

CENTRO UNIVERSITÁRIO FEI
MARIANA TORTELLA MERLI FIORANTE

VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DOS MODELAMENTOS COMPUTACIONAIS DE
CICLOS TÉRMICOS DE SOLUBILIZAÇÃO DE UM AÇO
INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX

São Bernardo do Campo

2018

MARIANA TORTELLA MERLI FIORANTE

VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DOS MODELAMENTOS COMPUTACIONAIS DE
CICLOS TÉRMICOS DE SOLUBILIZAÇÃO DE UM AÇO
INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX

Trabalho de Final de Curso apresentado ao Centro Universitário FEI, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Bacharel em Engenharia de Materiais. Orientado pelo Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco.

São Bernardo do Campo

2018

MARIANA TORTELLA MERLI FIORANTE

VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DOS MODELAMENTOS COMPUTACIONAIS DE
CICLOS TÉRMICOS DE SOLUBILIZAÇÃO DE UM AÇO
INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX

Trabalho de Final de Curso apresentado ao
Centro Universitário FEI, como parte dos
requisitos necessários para obtenção do título
de Bacharel em Engenharia de Materiais.
Orientado pelo Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco.

Comissão julgadora

Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco

Prof. Dr. Júlio César Dutra

Luara da Costa Moraes

São Bernardo do Campo

2018

Ao meu irmão, José Fernando Merli Fiorante
Filho, a quem desejo sucesso profissional a
passos largos.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Rose e José Fernando, pelo apoio incondicional e incentivo durante toda a trajetória da faculdade.

Ao meu irmão, Nandinho, por estar sempre ao meu lado.

Ao Fabio, pelo apoio, incentivo e compreensão.

Ao professor Dr. Rodrigo Magnabosco, pela confiança e orientações para a elaboração deste trabalho, bem como na participação do meu desenvolvimento profissional.

A todos meus amigos, principalmente aos colegas de sala, pelas melhores gargalhadas e amizade sincera.

Aos funcionários do Centro de Desenvolvimento de Materiais Metálicos (CDMatM-FEI), por toda ajuda e amizade.

A todos os professores do ciclo básico e do departamento de Engenharia de Materiais da FEI, pela fundamental participação em minha formação profissional.

A Uniforja, também pela participação em minha formação profissional.

A comissão julgadora pela disponibilidade e contribuição no desenvolvimento deste trabalho.

*Um mundo melhor não só é possível:
é indispensável.*

Enrique Barrios

RESUMO

O presente trabalho tem por objetivo realizar a simulação computacional do equilíbrio e da cinética de transformação de fases do aço inoxidável superdúplex UNS S32750 aquecido a partir da condição inicial até 1250°C e aquecido de 1250°C até a temperatura de equilíbrio das fases, onde coexistem 50% de ferrita e 50% de austenita, utilizando-se os softwares Thermo-Calc e DICTRA, bem como a validação experimental em laboratório dos resultados destas simulações. Os dados de entrada para a simulação são composição química e tamanho das fases, temperatura de aquecimento, bases de dados termodinâmicas TCFE8 e SSOL4 e bases de dados de mobilidade atômica MOBFE3 e MOB2, obtendo-se resultados para diferentes modelos e geometrias de simulação, buscando o que melhor descreve a cinética de transformação das fases. Foram gerados gráficos que possibilitaram avaliar como ocorre a evolução da fração volumétrica de ferrita e de austenita durante o aquecimento, bem como se comportam os perfis de composição durante a cinética de transformações de fases. Observou-se nas simulações que apesar da fração de ferrita estabilizar-se entre 100s e 1000s (16 min) e a austenita após 20000s (5,5h), os elementos químicos levam 2160s (36 min) para entrar em equilíbrio na ferrita e 36000s (10h) na austenita, ou seja, o equilíbrio só é plenamente atingido muito após a fração das fases se estabelecer, fato que os experimentos não são capazes de detectar. A validação experimental das frações das fases obtidas mostrou, por estereologia quantitativa, que tanto a fase ferrítica aquecida a 1250°C quanto a fase austenítica aquecida a 1088°C se estabilizam após 30 min de tratamento térmico, atingindo-se 71% de ferrita e 51% de austenita, também nas simulações. O modelo geométrico que simula grãos planares e considera somente os principais elementos químicos de interesse é o que melhor descreve os resultados experimentais.

Palavras-chave: Aço inoxidável superdúplex. Solubilização. Transformação de fases. Modelamento matemático. DICTRA.

ABSTRACT

The aim of the present work is to perform a computational simulation of the equilibrium and phase transformation kinetics of the superduplex stainless steel UNS S32750 heated to 1250°C from the initial condition and heated from 1250°C until the temperatures where the phases are in equilibrium, where 50% of ferrite and 50% of austenite coexists, using the softwares Thermo-Calc and DICTRA, as well as the experimental validation in the laboratory of the results of these simulations. The input data for the simulation are chemical composition and phase size, heating temperature, thermodynamic databases TCFE8 and SSOL4 and atomic mobility databases MOBFE3 and MOB2, obtaining results for different models and geometry of simulation, searching for what best describes kinetics. The evolution of ferrite and austenite volumetric fraction during simulated heat treatments was evaluated, as well as the composition profiles during treatment. It was observed that although the ferrite fraction stabilizes between 100s and 1000s (16 min) and the austenite after 20000s (5,5h), the chemical elements took 2160s (36 min) to come into equilibrium in ferrite and 36000s (10h) in austenite, that is, the equilibrium is only fully attained long after the phases' fraction stabilizes, a fact which the experiments are not able to detect. The experimental validation of the phases' fractions obtained showed, by quantitative stereology, that the ferritic phase heated to 1250°C and the austenitic phase heated to 1088°C stabilize after 30 min of heat treatment, reaching 71% of ferrite and 51% of austenite, also in the simulations. The geometric model that simulates planar grains and considers only the main chemical elements of interest is what best describes the experimental results.

Key-words: Superduplex stainless steel. Solubilization. Phases transformation. Mathematical modeling. DICTRA.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1000°C.....	9
Figura 2 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1200°C.....	10
Figura 3 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1300°C.....	10
Figura 4 – Crescimento de grão do aço inoxidável dúplex UNS S31803 para diferentes temperaturas em função do tempo de solubilização	11
Figura 5 – Diagrama de fases do aço inoxidável dúplex UNS S32101.....	12
Figura 6 – Influência do expoente ‘n’ de K-J-M-A na forma de crescimento da curva sigmoideal.....	14
Figura 7 – Propriedades mecânicas em função da % volumétrica de ferrita.....	16
Figura 8 – Fração das fases em função da temperatura para o aço UNS S32750	18
Figura 9 – Comparação entre a temperatura de solubilização para o aço UNS 31803 de composição química completa em a) e composição química reduzida em b)	19
Figura 10 – Modelo geométrico utilizado na simulação computacional.....	20
Figura 11 – Perfil de Cr após diferentes tempos de envelhecimento a 950°C.....	22
Figura 12 – Fração volumétrica de sigma após envelhecimento a 950°C.....	22
Figura 13 – Fração volumétrica de ferrita após envelhecimento a 940°C	23
Figura 14 – Perfil de Cr após diferentes tempos de envelhecimento a 940°C.....	24
Figura 15 – Microscopia óptica da amostra original	31
Figura 16 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8 a 1250°C.....	33
Figura 17 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C.....	33
Figura 18 – Variação da % em massa de Cr em função da distância para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	34
Figura 19 – Variação da % em massa de Mo em função da distância para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C.....	35
Figura 20 – Variação da % em massa de Ni em função da distância para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C.....	36
Figura 21 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	36

Figura 22 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8 a 1250°C	38
Figura 23 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	38
Figura 24 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C....	39
Figura 25 – Variação da % em massa do Mo em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C....	40
Figura 26 – Variação da % em massa do Ni em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	40
Figura 27 – Variação da % em massa do Mn em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	41
Figura 28 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	42
Figura 29 – Variação da % em massa do W em função da distância para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C	42
Figura 30 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4 a 1250°C	43
Figura 31 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	44
Figura 32 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	45
Figura 33 – Variação da % em massa do Mo em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	45
Figura 34 – Variação da % em massa do Ni em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	46
Figura 35 – Variação da % em massa do Mn em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	47
Figura 36 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	47
Figura 37 – Variação da % em massa do W em função da distância para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C.....	48
Figura 38 – Comparação do crescimento da fração de ferrita entre os 3 modelos.....	49
Figura 39 – Microscopia óptica da amostra 1, solubilizada a 1250°C por 36s.....	50

Figura 40 – Microscopia óptica da amostra 7, solubilizada a 1250°C por 60s.....	50
Figura 41 – Microscopia óptica da amostra 19, solubilizada a 1250°C por 120s.....	51
Figura 42 – Microscopia óptica da amostra 3, solubilizada a 1250°C por 1800s.....	51
Figura 43 – Microscopia óptica da amostra 13, solubilizada a 1250°C por 2400s.....	52
Figura 44 – Microscopia óptica da amostra 2, solubilizada a 1250°C por 3h	53
Figura 45 – Microscopia óptica da amostra 18, solubilizada a 1250°C por 3h.....	53
Figura 46 – Comparação entre os diferentes métodos de quantificação da fase ferrítica a 1250°C.....	55
Figura 47 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1084°C.....	56
Figura 48 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1115°C	56
Figura 49 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1064°C.....	57
Figura 50 – Comparação do crescimento da fração de austenita entre os 3 modelos para estrutura dúplex	58
Figura 51 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1084°C	59
Figura 52 – Microscopia óptica da amostra 4, solubilizada a 1088°C por 120s.....	60
Figura 53 – Microscopia óptica da amostra 5, solubilizada a 1088°C por 1800s.....	61
Figura 54 – Microscopia óptica da amostra 9, solubilizada a 1088°C por 3h	61
Figura 55 – Microscopia óptica da amostra 14, solubilizada a 1088°C por 12h	62
Figura 56 – Microscopia óptica da amostra 18, solubilizada a 1088°C por 36h	62
Figura 57 – Comparação entre os diferentes métodos de quantificação da fase austenítica a 1088°C	63
Figura 58 – Modelo geométrico utilizado na nova simulação computacional	64
Figura 59 – Comparação entre os diferentes modelos geométricos e métodos de quantificação da fase ferrítica a 1250°C, para o modelo 1	67
Figura 60 – Comparação entre os diferentes modelos geométricos e métodos de quantificação da fase austenítica a 1088°C, para o modelo 1	67
Figura 61 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1, esférico, composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C.....	68
Figura 62 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1, esférico, composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1084°C.....	69

Figura 63 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.	75
Figura 64 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.	76
Figura 65 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.	76
Figura 66 – Variação da % em massa de Cr em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	77
Figura 67 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	78
Figura 68 – Variação da % em massa de Mn em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	78
Figura 69 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	79
Figura 70 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	79
Figura 71 – Variação da % em massa de W em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.	80
Figura 72 – Variação da % em massa de Cr em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.	80
Figura 73 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.	81
Figura 74 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.	81
Figura 75 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.	82
Figura 76 – Variação da % em massa de W em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.	82
Figura 77 – Fração de ferrita em função do tempo, modelo 1, geometria esférica a 1250°C. .	83
Figura 78 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.	84
Figura 79 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.	84

Figura 80 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.....	85
Figura 81 – Fração de austenita em função do tempo, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.	86
Figura 82 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.....	87
Figura 83 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.....	87
Figura 84 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.....	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Valores do expoente ‘n’ de K-J-M-A	14
Tabela 2 – Propriedades mecânicas do aço inoxidável superdúplex UNS S32750 após tratamento térmico de solubilização.	15
Tabela 3 – Composição química (% em massa) do aço em estudo	25
Tabela 4 – Composição química reduzida (% em massa) do aço em estudo	26
Tabela 5 – Composição química completa (% em massa) do aço em estudo	26
Tabela 6 – Parâmetros utilizados para a simulação do aquecimento para forjamento	27
Tabela 7 – Parâmetros utilizados para a simulação do aquecimento para solubilização para estrutura dúplex	28
Tabela 8 – Resumo dos tratamentos térmicos realizados	29
Tabela 9 – Parâmetros utilizados para a simulação do modelo 1, esférico	65

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	6
2	REVISÃO DA LITERATURA	8
2.1	AÇOS INOXIDÁVEIS SUPERDÚPLEX	8
2.2	CRESCIMENTO DE SEGUNDA FASE	12
2.3	TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO	15
2.4	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	16
2.4.1	Thermo-Calc	17
2.4.2	DICTRA	20
3	METODOLOGIA	25
3.1	MATERIAL	25
3.2	SIMULAÇÕES DE EQUILÍBRIO	25
3.3	TRATAMENTO TÉRMICO	28
3.4	ANÁLISE MICROESTRUTURAL	29
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	31
4.1	CARACTERIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA ORIGINAL	31
4.2	MODELAMENTO COMPUTACIONAL A 1250°C	32
4.2.1	Modelo 1: Análise da simulação realizada com composição química reduzida, utilizando-se as bases de dados TCFE8 e MOBFE3 a 1250°C.	32
4.2.2	Modelo 2: Análise da simulação realizada com composição química completa, utilizando-se as bases de dados TCFE8 e MOBFE3 a 1250°C.	37
4.2.3	Modelo 3: Análise da simulação realizada com composição química completa, utilizando-se as bases de dados SSOL4 e MOB2 a 1250°C.	43
4.2.4	Comparação da evolução de ferrita em função do tempo para os modelos.	48
4.3	VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRATAMENTO TÉRMICO A 1250°C.	49
4.4	MODELAMENTO COMPUTACIONAL DO TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA A ESTRUTURA DÚPLEX	55

4.4.1	Comparação da evolução de austenita em função do tempo para os modelos.	57
4.5	VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA A ESTRUTURA DÚPLEX	59
4.6	NOVAS ESTRATÉGIAS DE SIMULAÇÃO.....	64
4.6.1	Comparação da evolução das fases em função do tempo para os modelos geométricos e métodos de quantificação.....	66
5	CONCLUSÕES.....	70
6	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	71
	APÊNDICE A – MODELO GEOMÉTRICO PLANAR, TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA ESTRUTURA DÚPLEX.	75
	APÊNDICE B – MODELO GEOMÉTRICO ESFÉRICO, TRATAMENTO TÉRMICO A 1250°C.	83
	APÊNDICE C – MODELO GEOMÉTRICO ESFÉRICO, TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA ESTRUTURA DÚPLEX.	86

1 INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

Aços inoxidáveis são ligas ternárias de ferro (Fe), cromo (Cr) e níquel (Ni) produzidas para nobres aplicações incluindo setores petroquímicos, aeronáuticos e de óleo e gás, visto que são altamente resistentes à corrosão. O percentual de aproximadamente 12% de cromo mínimo em sua composição é capaz de promover o efeito conhecido como passivação do aço, ou seja, a formação de uma camada protetora por toda extensão da superfície do material, protegendo-o de reações com o meio no qual está inserido (SOLOMON; DEVINE, 1982).

Dentre os tipos de aços inoxidáveis, classificados de acordo com a microestrutura, existem os dúplex (AID), os quais apresentam em sua estrutura volumes aproximadamente iguais de ferrita (α) e austenita (γ), ambas inoxidáveis, (SOLOMON; DEVINE, 1982) e os superdúplex (AISD), que além de permitirem a mesma combinação de fases, possuem quantidades suficientes de cromo, molibdênio (Mo) e nitrogênio (N) capazes de produzirem uma resistência equivalente a pite (PREN – Pitting Resistance Equivalent Number) superior a 40 em ambientes contendo haletos, especialmente cloretos (Cl⁻) (SOLOMON; DEVINE, 1982; NILSSON, 1992).

A estrutura dúplex é metaestável e obtida por tratamento térmico de solubilização seguida de resfriamento em água e, uma vez que é homogênea e de granulação refinada, permite ainda que a dureza e resistência mecânica do material sejam superiores a de aços inoxidáveis convencionais, tornando-o um material completo e de importância estrutural e tecnológica.

Sabendo-se disso, a avaliação da cinética de transformação de fases bem como a caracterização microestrutural dos aços inoxidáveis torna-se importante, uma vez que permitem entender com precisão a influência da microestrutura nos comportamentos mecânico e químico do material, permitindo melhorias.

De acordo com as pesquisas de Solomon e Devine (1982), o trabalho a quente dos AISD deve ocorrer em altas temperaturas nas quais o aço ainda possui uma estrutura dúplex, ou seja, entre 1000°C e 1300°C, visto que acima desta faixa pode ocorrer crescimento de grãos e oxidação do material, enquanto que abaixo pode causar precipitação de fases frágeis e, portanto, indesejadas (SOLOMON; DEVINE, 1982).

Por este motivo, optou-se por aquecer o material a 1250°C neste trabalho, que tem por objetivo a simulação computacional do equilíbrio e da cinética de transformação de fases do aço inoxidável superdúplex UNS S32750, durante os ciclos térmicos de

solubilização, utilizando-se os softwares Thermo-Calc e DICTRA, bem como a validação experimental em laboratório dos resultados destas simulações.

A simulação é feita nas duas condições térmicas de processamento: o aquecimento do material que se encontra na condição inicial até 1250°C, com intuito de obter propriedades como ductilidade e tenacidade a fim de promover deformação plástica sem que haja ruptura, e o tratamento térmico de solubilização após o forjamento, de 1250°C até a condição de equilíbrio entre as fases, ou seja, 50% de ferrita e 50% de austenita.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Nesta seção serão apresentados todos os conceitos que envolvem o estudo da cinética de transformações de fases que o aço inoxidável superdúplex UNS S32750 sofre ao ser aquecido até 1250°C para forjamento, bem como durante a solubilização até onde coexistem 50% de cada fase. Além disso, será abordado o embasamento matemático utilizado para a realização do modelamento nos softwares comerciais Thermo-Calc e DICTRA.

2.1 AÇOS INOXIDÁVEIS SUPERDÚPLEX

Os primeiros aços inoxidáveis datam do início do século XX na Inglaterra e surgiram através de experimentos errôneos cujo objetivo era obter canos de aço para armas mais resistentes ao desgaste. Durante os testes, o inglês Harry Brearley experimentou modificar as composições das ligas, variando as porcentagens de cromo em aços com diferentes teores de carbono (C), resultando em um material resistente à corrosão. Na época, considerava-se inoxidável o aço que resistisse à corrosão do ácido sulfúrico, o mais popular e utilizado ácido inorgânico do país (BSSA, 2017).

Hoje, sabe-se que a resistência à corrosão é fortemente relacionada à quantidade de cromo que o aço possui, elemento este que possui elevada afinidade química pelo oxigênio, sendo capaz de formar uma película passiva e aderente de óxido de cromo, quase que instantaneamente, sobre toda a superfície do aço. Muito embora muitos dos aços inoxidáveis austeníticos (AIA) e aços inoxidáveis ferríticos (AIF) possuam aproximadamente 19% de cromo, apresentam certas limitações quanto ao comportamento mecânico. Os AIFs, por exemplo, são mais baratos por normalmente não terem níquel em sua composição, mas apresentam menor tenacidade em relação aos AIAs, além de baixa soldabilidade. Já os AIAs, apesar de serem mais caros e mais tenazes, são suscetíveis à corrosão-fadiga (POTGIETER; CORTIE 1991).

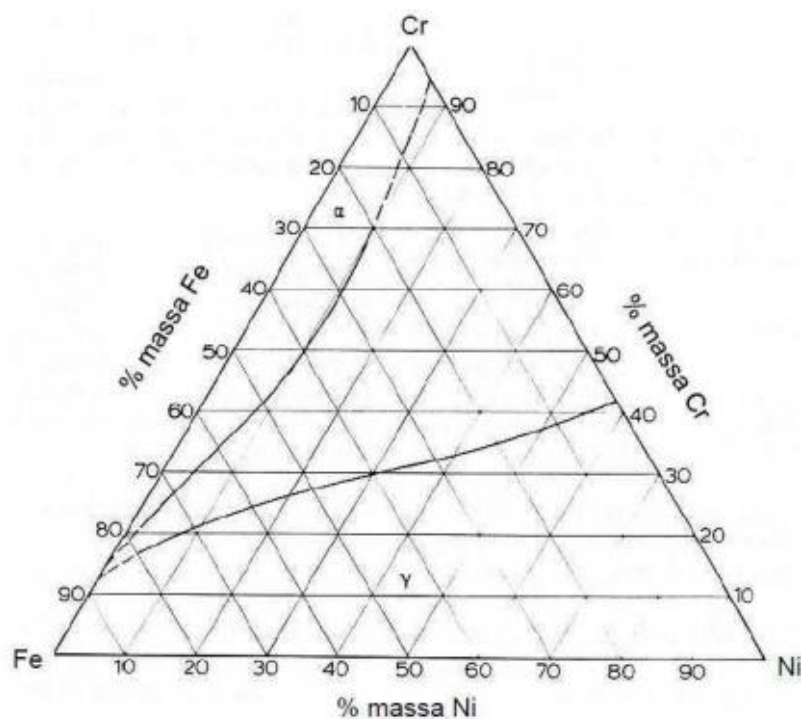
Sendo assim, tais aços inoxidáveis tradicionais não apresentam adequados comportamentos mecânicos e à corrosão para específicas aplicações. Porém, os estudos foram aprofundados por volta de 1927, quando Bain e Griffiths observaram nas seções isotérmicas do diagrama ternário Fe-Cr-Ni, entre 1000°C e 1300°C, a coexistência de ferrita e austenita na estrutura, conforme apresentados na Figura 1, Figura 2 e Figura 3 (POTGIETER; CORTIE 1991; BAIN; GRIFFITHS, 1927; RAYNOR; RIVLIN, 1988).

Percebeu-se então, que a nova combinação conferia ao material todas as características necessárias que os AIAs e AIFs possuem por si só, obtendo-se os aços inoxidáveis dúplex e superdúplex.

A denominação dúplex se deve por coexistirem em sua estrutura duas fases inoxidáveis de iguais frações em volume, ou seja, 50% de ferrita e 50% de austenita. Os aços inoxidáveis superdúplex, por sua vez, apresentam além da combinação das fases, concentrações de cromo, molibdênio e nitrogênio capazes de produzirem uma resistência equivalente à corrosão por pite (PREN – Pitting Resistance Equivalent Number) superior a 40 (NILSSON, 1992), a qual é quantificada empiricamente através da equação 1:

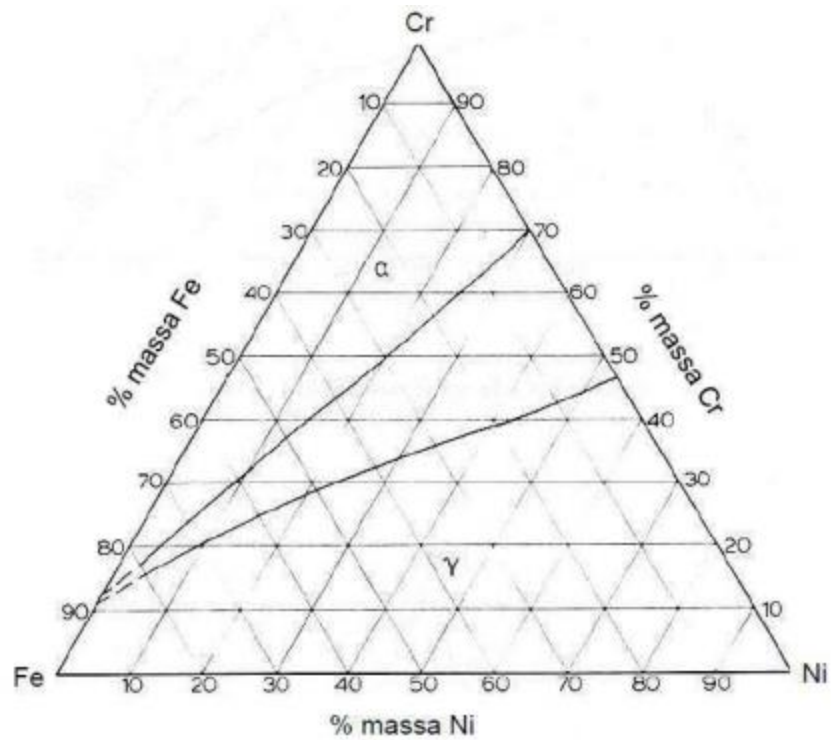
$$\text{PREN} = \% \text{Cr} + 3,3\% \text{Mo} + 16\% \text{N} \quad (1)$$

Figura 1 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1000°C



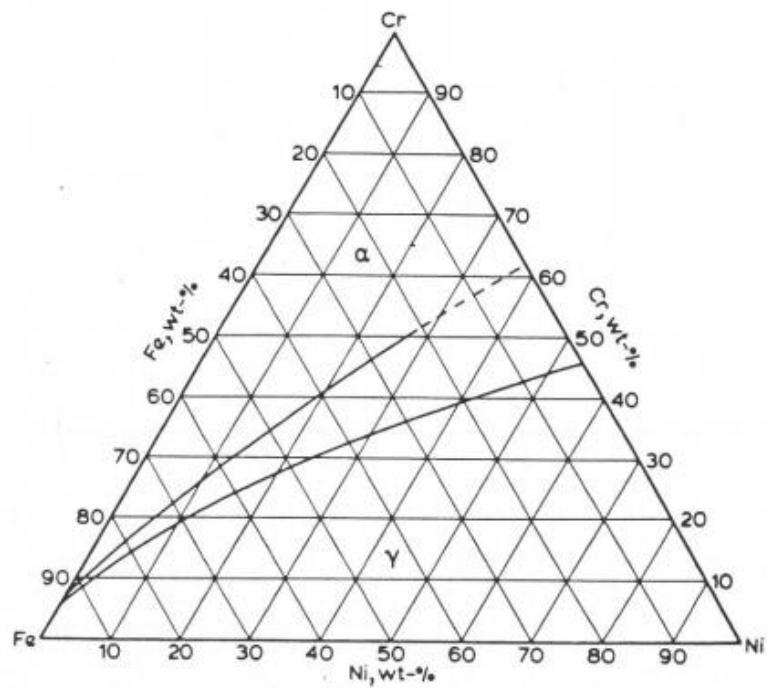
Fonte: Raynor e Rivlin, 1988

Figura 2 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1200°C



Fonte: Raynor e Rivlin, 1988

Figura 3 – Seção isotérmica do ternário Fe-Cr-Ni a 1300°C

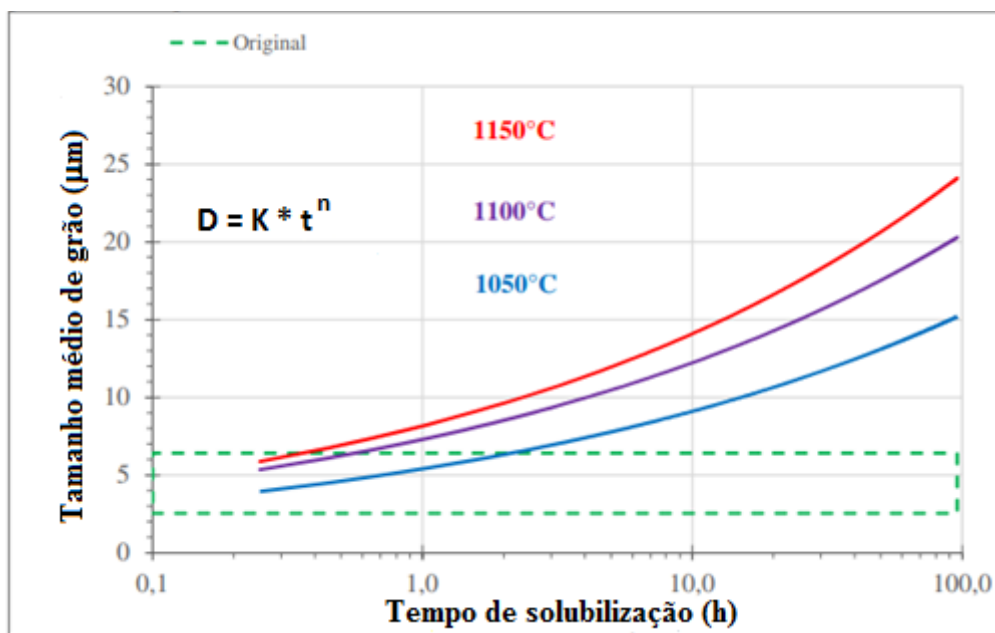


Fonte: Raynor e Rivlin, 1988

Além disso, ambos os aços constituem sistemas termodinamicamente metaestáveis, pois são obtidos através do tratamento térmico de solubilização, seguido de um rápido resfriamento em água, de modo que a estrutura que outrora estaria estável apenas em altas temperaturas se mantenha à temperatura ambiente (BAIN; GRIFFITHS, 1927; MAGNABOSCO, 2015).

Portanto, deve-se estar atento em relação ao tempo e temperatura durante o tratamento térmico do aço, visto que qualquer insumo de energia (calor) que este receber, tenderá a buscar o equilíbrio, podendo resultar em precipitações de fases secundárias que são, muitas vezes, indesejadas, além de crescimento de grãos a ponto de deteriorar as propriedades mecânicas, conforme Figura 4 (NILSSON, 1992; PORTER; EASTERLING, 1992, LEANDRO, 2016).

Figura 4 – Crescimento de grão do aço inoxidável dúplex UNS S31803 para diferentes temperaturas em função do tempo de solubilização



Fonte: Autora “adaptado de” Leandro, 2016, p.86

Baseando-se nos diagramas ternários de Raynor e Rivlin (1988) e na faixa de trabalho proposta por Solomon e Devine (1982), optou-se por realizar o aquecimento a 1250°C da amostra do aço em estudo neste trabalho, UNS S32750, simulando a condição térmica enfrentada durante o forjamento, ou seja, aquecimento para conformar plasticamente, e o necessário tratamento de formação da estrutura dúplex após o ciclo anterior.

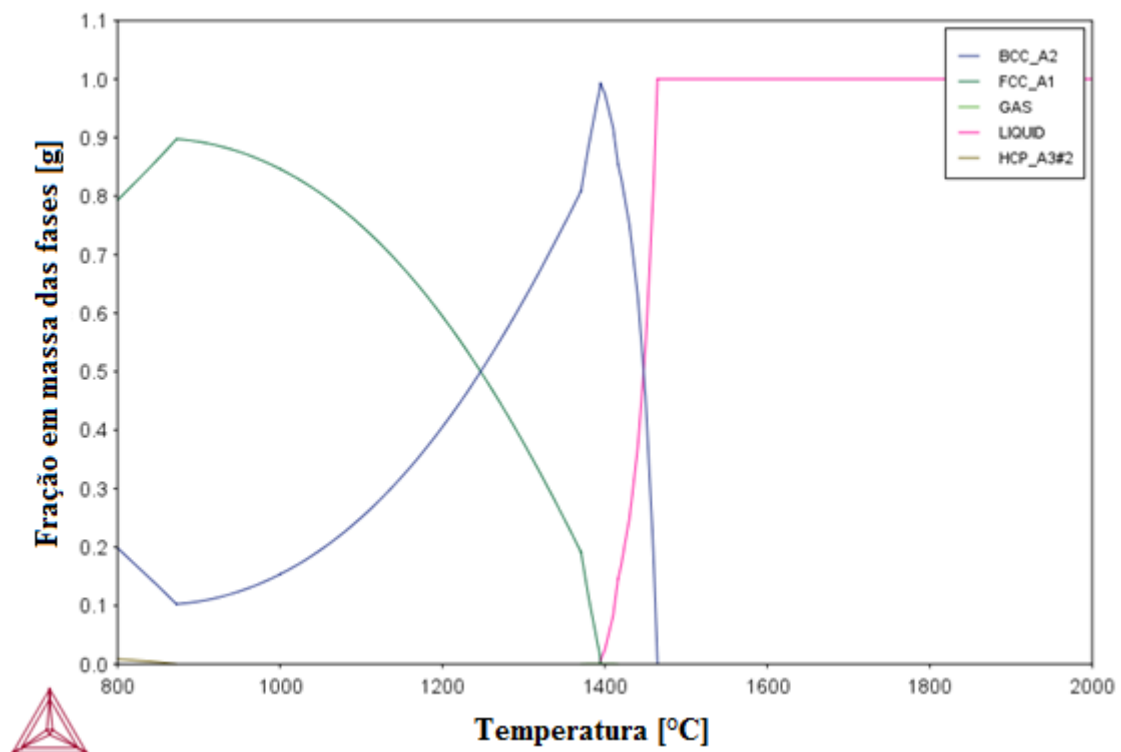
2.2 CRESCIMENTO DE SEGUNDA FASE

A obtenção de um aço inoxidável superdúplex é dada pelo tratamento térmico de solubilização e controlada por mecanismos de nucleação e crescimento das fases.

Sabe-se pela simples observação de um diagrama de equilíbrio, que basta alterar-se a temperatura do material para que ocorram transformações de fases ou alterações na composição química. Segundo Porter e Easterling (2009), além da temperatura, também influenciam na cinética de formação de fases a taxa de nucleação, a taxa de crescimento, o tempo e a distribuição dos sítios de nucleação.

No exemplo da Figura 5, tem-se que para o AID UNS S32101 a primeira transformação de fase ocorre a 1441°C quando surgem núcleos de ferrita (BCC_A2) em meio à fase líquida, seguida de nucleação de austenita (FCC_A1) em 1400°C. Conforme é reduzida a temperatura, fases frágeis como a sigma e nitretos de cromo também podem nuclear.

Figura 5 – Diagrama de fases do aço inoxidável dúplex UNS S32101



Fonte: Autora

Legenda: Composição química: Fe- 21,00%Cr – 1,35%Ni – 0,5%Mo – 0,21%N – 0,040%C – 4,38%Mn

A cinética de transformação de fases envolvendo os mecanismos de nucleação e crescimento segue a equação de Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (K-J-M-A), em que a evolução da fração de fase segue um comportamento sigmoidal em função do tempo, segundo a Equação 2.

$$f = 1 - e^{(-K.t^n)} \quad (2)$$

Onde:

K = Constante dependente da energia de ativação para formação de fase;

t = Tempo [s];

n = Expoente de K-J-M-A;

f = Fração de fase formada;

Segundo Christian (2002) o valor do expoente ‘n’ não é constante durante todo o processo de nucleação e crescimento de fase, podendo iniciar em 4, na fase de precipitação e terminar em 1, na fase de crescimento, como pode ser visto na Tabela 1.

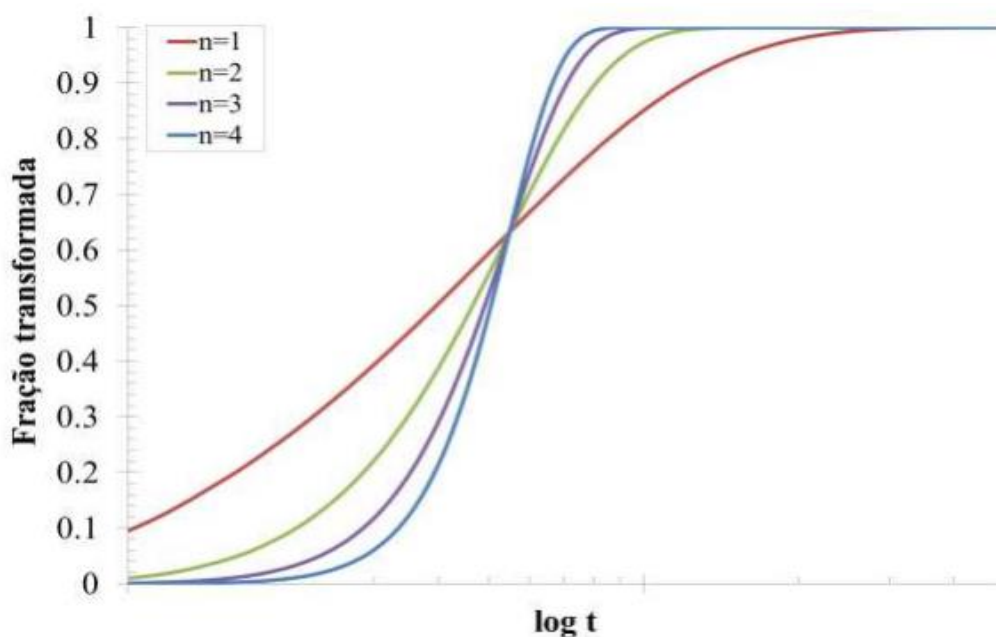
Mudanças nos valores do expoente ‘n’ de K-J-M-A não são dependentes da temperatura, mas da geometria do crescimento dos núcleos, a qual pode ser, por exemplo, tridimensional (n=4), bidirecional em placas (n=3), unidirecional acicular (n=2) ou independente do formato (n=1) das partículas formadas (PORTER; EASTERLING, 1992). Tais mudanças em ‘n’ afetam a forma da curva sigmoidal proposta por Avrami (1939), como mostra a curva esquematizada por Santos (2013) para o AID UNS S31803, conforme Figura 6.

Tabela 1 – Valores do expoente ‘n’ de K-J-M-A

	Condições	n
Precipitação descontínua, reações eutetóides, crescimento controlado por interface	Taxa de nucleação crescente	>4
	Taxa de nucleação constante	4
	Taxa de nucleação decrescente	3-4
	Taxa de nucleação nula (saturação dos sítios de nucleação)	3
	Nucleação após a saturação no ponto triplo	2
	Nucleação em contorno de grão após saturação	1
	Crescimento controlado por difusão	Todas as formas crescendo a partir de pequenas dimensões, com taxa de nucleação crescente
Todas as formas crescendo a partir de pequenas dimensões, taxa de nucleação constante		2 ½
Todas as formas crescendo a partir de pequenas dimensões, com diminuição na taxa de nucleação		1½ - 2½
Todas as formas crescendo a partir de pequenas dimensões, taxa de nucleação nula		1 ½
Crescimento de partículas com volume inicial apreciável		1 - 1 ½
Espessamento de placas grandes		1/2
Precipitação em discordâncias		~ 2/3

Fonte: Christian, 2002, p. 546

Figura 6 – Influência do expoente ‘n’ de K-J-M-A na forma de crescimento da curva sigmoidal



Fonte: Santos, 2013, p. 65

2.3 TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO

O tratamento de solubilização de aços dúplex é dado pelo aquecimento do aço inoxidável até a temperatura onde tem-se a condição dúplex, de modo que os mecanismos de nucleação e crescimento ocorram até atingir-se a homogeneidade do material no que se diz respeito às fases presentes.

De acordo com os dados do Metals Handbook Desk Edition (1998), as propriedades mecânicas esperadas para o AISD UNS 32750 estão indicadas na Tabela 2 e possuem relação direta com a fração na microestrutura das fases ferrita e austenita formadas.

Tabela 2 – Propriedades mecânicas do aço inoxidável superdúplex UNS S32750 após tratamento térmico de solubilização.

Limite de Resistência (MPa)	Limite de Escoamento (MPa)	Alongamento (%)	Dureza (HRC)
800	550	15	32

Fonte: Metals Handbook Desk Edition, 1998, p. 876

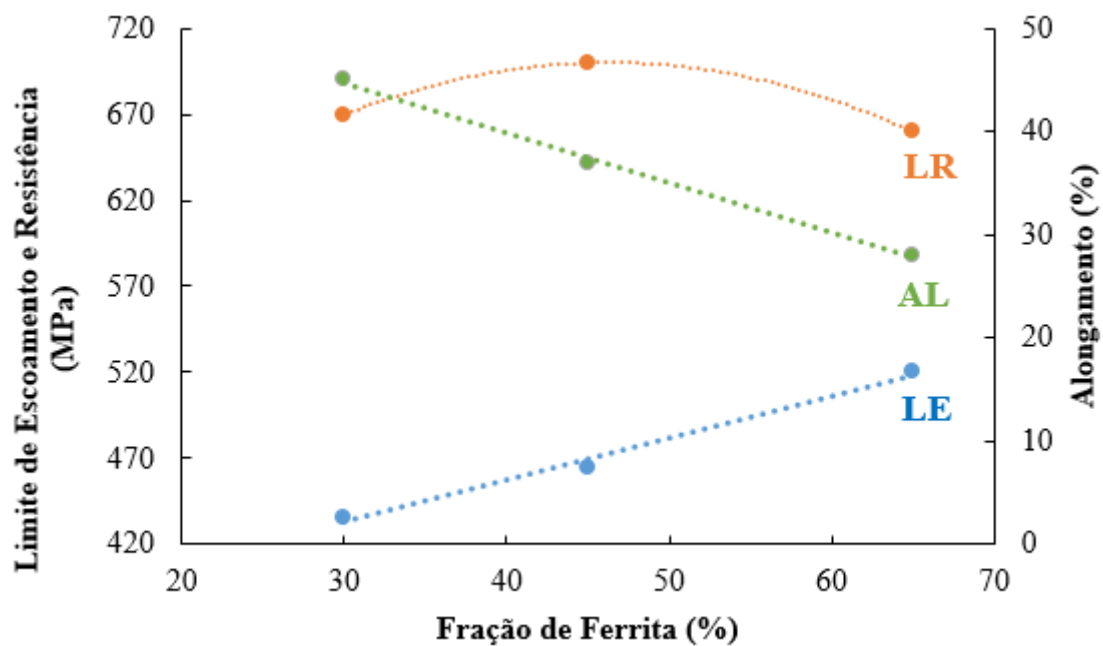
Os efeitos das frações de ferrita e austenita no limite de resistência, tenacidade e ductilidade são atribuídos às propriedades individuais de cada fase. A ferrita apresenta maior limite de escoamento e dureza, bem como menor tenacidade e ductilidade em relação a austenita após solubilização do aço inoxidável (NILSSON, 1992). Quando adicionada ao AIA para criar o dúplex, a ferrita incrementa o limite de escoamento, mesmo em menores temperaturas. Além disso, o limite de escoamento está diretamente ligado ao tamanho de grão, pela equação de Hall Petch, de modo que quanto menor o grão de ferrita for, maior será esta propriedade (DIETER, 1988; FLOREEN; HAYDEN, 1968; LEANDRO, 2016).

Na resistência à corrosão a ferrita também tem grande participação, uma vez que minimiza a ocorrência de sensitização, aumenta a resistência à corrosão intergranular e à corrosão-fadiga. E, apesar de reduzir a ocorrência de trincas à quente no aço inoxidável, reduz a sua ductilidade pela propagação de trincas de clivagem, o que impede que o material seja endurecido até a mais alta resistência mecânica (SOLOMON; DEVINE, 1982).

Desta forma, percebe-se que com o aumento da fração volumétrica de ferrita, aumentos consideráveis no limite de escoamento seguido de redução na tenacidade, podem fazer de um AISD obtido em maiores temperaturas de tratamento térmico, com melhores propriedades mecânicas, por apresentar maior quantidade de ferrita (NILSSON, 1992). O gráfico que comprova os estudos das propriedades mecânicas feitos pelos autores acima encontra-se na Figura 7, adaptada de Forgas (2016).

Ainda, segundo Garfias-Mesias (1996), o aumento da fração volumétrica de ferrita também melhora o comportamento eletroquímico dos aços inoxidáveis, visto que ocorre diluição na fase de elementos responsáveis por resistência à corrosão, como é o caso do Cr e do Mo.

Figura 7 – Propriedades mecânicas em função da % volumétrica de ferrita



Fonte: Autora “adaptado de” Forgas 2016, p. 33 e 34

2.4 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

O modelamento computacional na engenharia metalúrgica e de materiais é amplamente utilizado ao redor do mundo tanto pela academia quanto pela indústria, por possibilitar o entendimento do comportamento de ligas multicomponentes de aços e metais não ferrosos. O Thermo-Calc é amplamente aplicado para cálculos termodinâmicos de sistemas estáveis e metaestáveis como diagramas de equilíbrio,

enquanto que o DICTRA possibilita a simulação de reações controladas por difusão e fora do equilíbrio como transformação e crescimento de fases (THERMO-CALC, 2017).

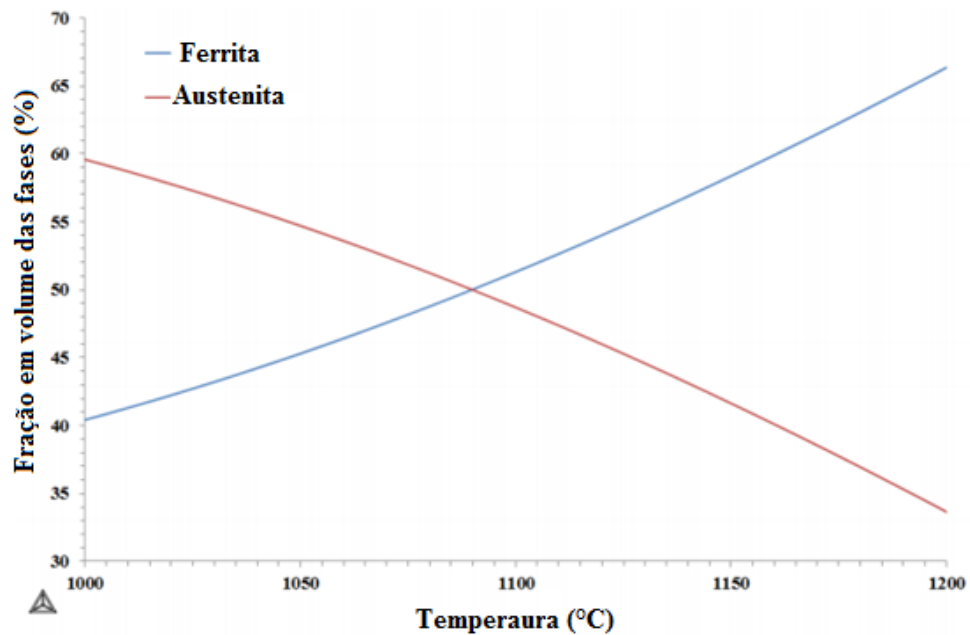
2.4.1 Thermo-Calc

Desenvolvido na década de 1980, o software Thermo-Calc é capaz de simular os mais diversos cálculos termodinâmicos graças aos modelos que possui e a uma ampla base de dados que incluem diferentes materiais, apresentando-se extremamente útil e atual (THERMO-CALC, 2017).

Os usuários têm a possibilidade de gerar um projeto especificando e configurando uma sequência de atividades individualmente, como definir um sistema, as condições para um cálculo de equilíbrio e até mesmo para traçar os resultados. O software é capaz de calcular o equilíbrio entre as fases de um material, as temperaturas de transformações de fases, o modelo de solidificação de Sheil-Gulliver, além de obter dados térmicos como entalpia, energia livre de Gibbs, entre outros (THERMO-CALC, 2017).

Autores do mundo todo utilizam o Thermo-Calc para diversos fins como pode ser visto nos exemplos a seguir. Forgas (2016) utilizou-se do software para ilustrar a variação da fração de fases em função da temperatura de solubilização para o aço UNS S32750 com a base de dados TCFE7, conforme Figura 8, verificando que com o aumento da temperatura de solubilização, maior é a fração volumétrica de ferrita, conforme também discutido em Tratamento Térmico de Solubilização (item 2.3).

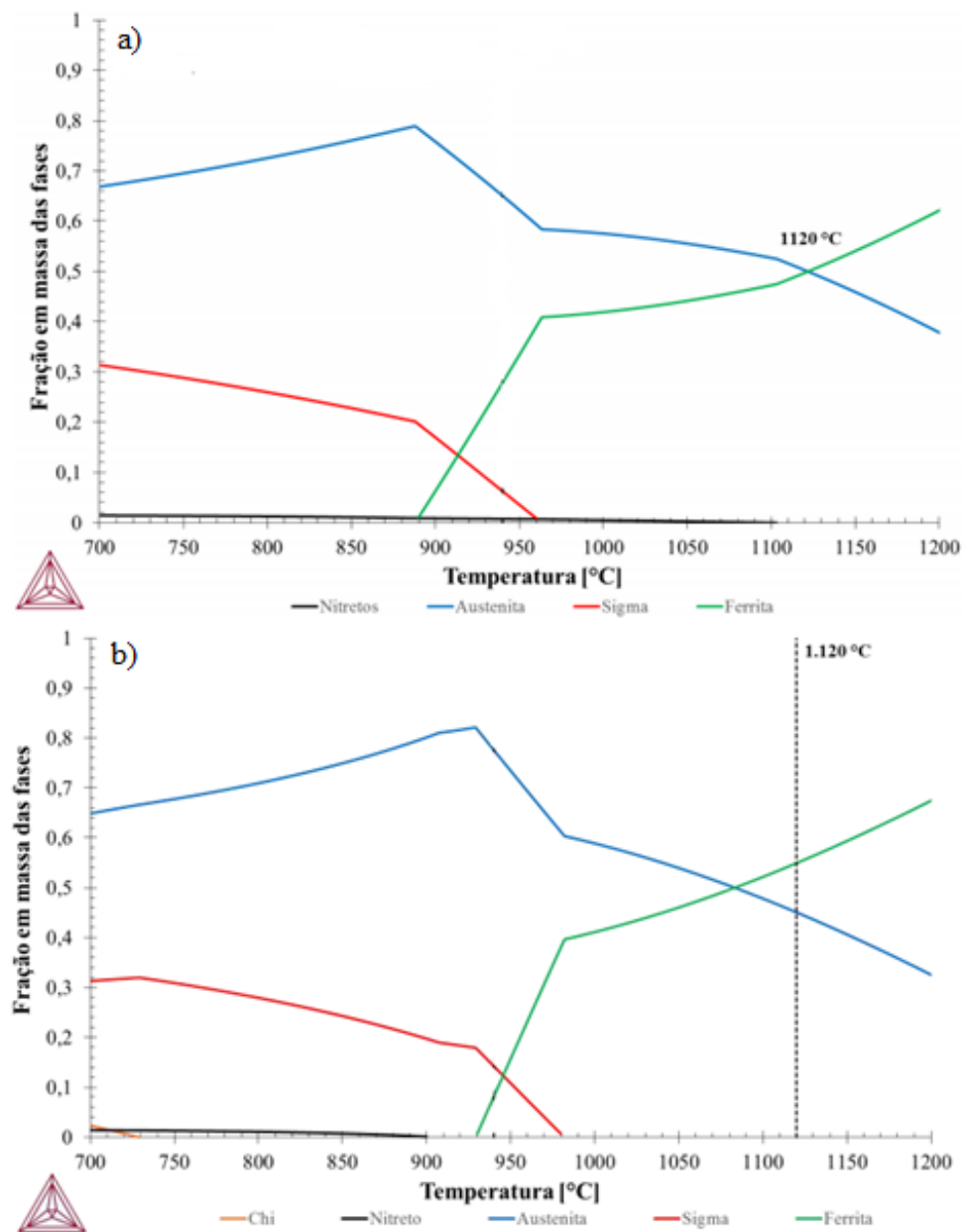
Figura 8 – Fração das fases em função da temperatura para o aço UNS S32750



Fonte: Forgas, 2016, p.26

Semelhante ao que foi realizado neste trabalho, Moraes (2016) utilizou do software em questão para simular o equilíbrio do AID UNS S31803 com base de dados TCFE8, para diferentes composições químicas, vide Figura 9, obtendo uma temperatura de solubilização para estrutura dúplex de 1120°C com composição química completa. Percebe-se que com a redução dos elementos químicos no cálculo do equilíbrio, a temperatura de 1120°C representa uma condição de 53% de ferrita e 47% de austenita, diferentemente do que acontece para a composição química completa.

Figura 9 – Comparação entre a temperatura de solubilização para o aço UNS 31803 de composição química completa em a) e composição química reduzida em b)



Fonte: Autora “adaptado de” Morais, 2017, p. 41

Legenda: (a) Composição química completa: Fe - 22,07%Cr - 5,68%Ni - 3,20%Mo - 1,38%Mn - 0,17%N - 0,017%C - 0,34%Si - 0,15%Cu - 0,13%V. (b) Composição reduzida: Fe - 22,07%Cr - 5,68%Ni - 3,20%Mo - 0,17%N

2.4.2 DICTRA

O software de transformações controladas por difusão, DICTRA, permite que simulações sejam feitas com condições reais através da ligação de modelos fundamentais a dados termodinâmicos e cinéticos. A base de dados termodinâmica é a mesma do Thermo-Calc, enquanto que a cinética é adicional e contém informações de coeficientes de difusão para cada elemento químico (THERMO-CALC, 2017).

As simulações são unidimensionais e a geometria utilizada pode ser planar, esférica ou cilíndrica. No caso deste trabalho, optou-se por iniciar o modelamento do sistema com geometria planar, conforme Figura 10. As setas na interface entre as fases ferrita e austenita indicam a direção na qual ocorre a difusão, a partir do momento em que o sistema apresenta diferença de potencial químico de algum elemento, buscando equalizá-los para atingir-se o equilíbrio.

Figura 10 – Modelo geométrico utilizado na simulação computacional



Fonte: Autora

A primeira Lei de Fick, Equação 3, equaciona o fenômeno da difusão, o qual ocorre em estado estacionário visto que o fluxo difusivo não varia ao longo do tempo. Já em sistemas onde o fluxo difusivo varia tanto com a distância quanto com o tempo, a difusão ocorre em estado não estacionário conforme segunda Lei de Fick, Equação 4 (PORTER; EASTERLING, 1992).

$$J = -D \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left(D \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (4)$$

Onde,

J = Fluxo de difusão do elemento químico [kg/(m².s)];

D = Coeficiente de difusão [m²/s];

$\partial C/\partial x$ = Gradiente de composição do elemento químico em função da distância [kg/m⁴];

$\partial C/\partial t$ = Gradiente de composição do elemento químico em função do tempo [kg/(m³.s)];

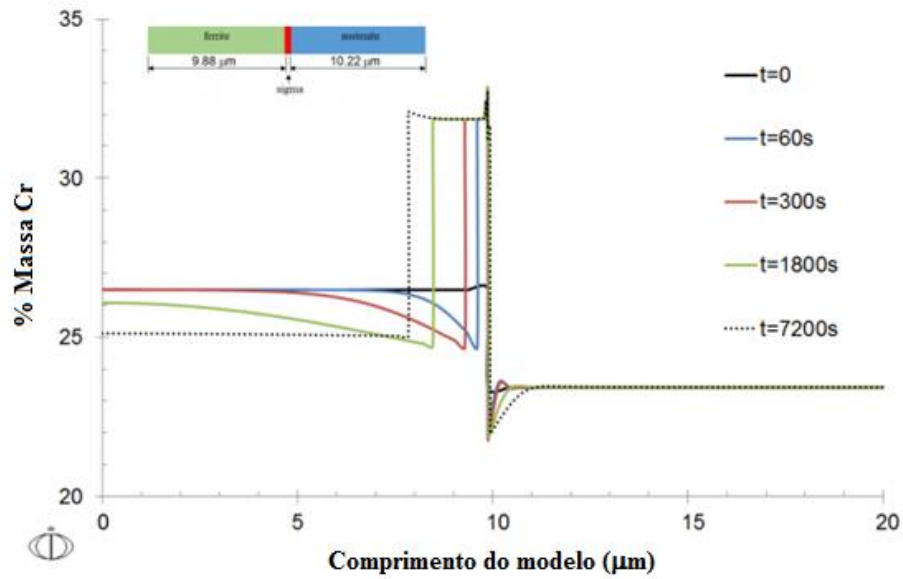
Alimentando-se o software com dados como a geometria do modelo, as fases que se deseja estudar, o comprimento de cada uma delas, o tempo e temperatura de tratamento térmico e bases de dados necessárias, o DICTRA realiza o cálculo do equilíbrio local do sistema para todo intervalo de tempo, assumindo dados de equilíbrio termodinâmico, fornecidos pelo Thermo-Calc, na interface entre as fases (BORGENTAM et al., 2000). Assim, é possível obter importantes propriedades do aço em estudo como o perfil de determinado elemento químico ao longo do comprimento do modelo e tempo de tratamento térmico, a fração de fases presentes a determinado tempo e temperatura, a posição da interface entre as fases e o seu equilíbrio, como serão apresentados em Resultados e Discussão (item 4).

Também é possível obter informações como o comportamento da microsegregação de elementos durante a solidificação do material, crescimento e dissolução de fases, comportamento do material após soldagem ou durante a sinterização, entre outros (THERMO-CALC, 2017). Alguns exemplos serão vistos a seguir.

Magnabosco (2015) utilizou o módulo de difusão DICTRA para estudar como o Cr se difunde no AISI S32750 a uma temperatura de envelhecimento de 950°C, por diferentes tempos, na interface de sigma. O autor notou que entre 1800s e 7200s ocorre a estabilização do Cr juntamente com o crescimento da fase sigma na ferrita, como mostra a Figura 11.

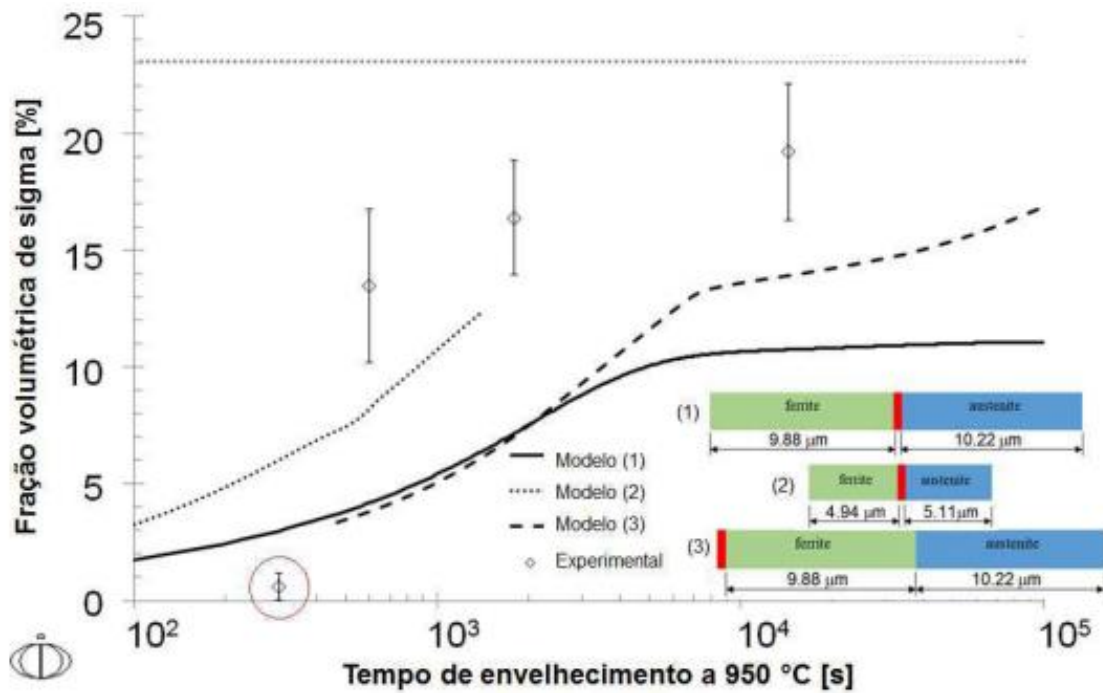
Em complemento, o autor mostra a simulação computacional da cinética de formação da fase sigma, também utilizando-se o software DICTRA e a base de dados MOB2, conforme Figura 12. Apesar da Figura 11 possibilitar a descrição do fenômeno de crescimento de sigma e de ferrita, além dos gradientes de composição esperados em torno da fase sigma, os modelos estudados não se mostraram capazes de descrever corretamente a evolução da fração em volume de sigma através do tempo de envelhecimento em 950°C, como pode ser visto na Figura 12.

Figura 11 – Perfil de Cr após diferentes tempos de envelhecimento a 950°C



Fonte: Autora “adaptado de” Magnabosco, 2015, fig. 4

Figura 12 – Fração volumétrica de sigma após envelhecimento a 950°C



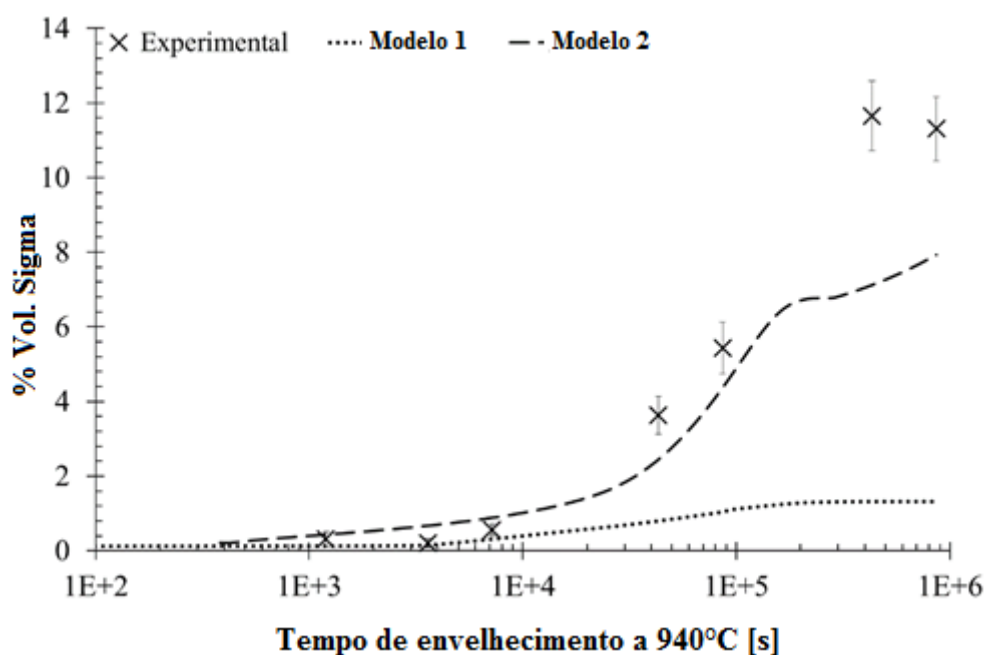
Fonte: Morais adaptado de Magnabosco, 2015, p. 38

Do mesmo grupo de pesquisa, Morais e Magnabosco (2017) realizaram a comparação da evolução da fração volumétrica de ferrita após um envelhecimento a 940°C, entre dois diferentes modelos simulados no DICTRA com os experimentos reais em laboratório, cujo modelo 1 é dado para fase sigma entre as fases ferrita e austenita, enquanto que o modelo 2 é dado pela fase sigma à direita das fases ferrita e austenita.

Os autores obtiveram a curva sigmoidal proposta por Avrami e valores de 1,32% de ferrita após 100 h para o modelo 1 e 7,89% após 240 h para o modelo 2, vide Figura 13 (MORAIS; MAGNABOSCO, 2017).

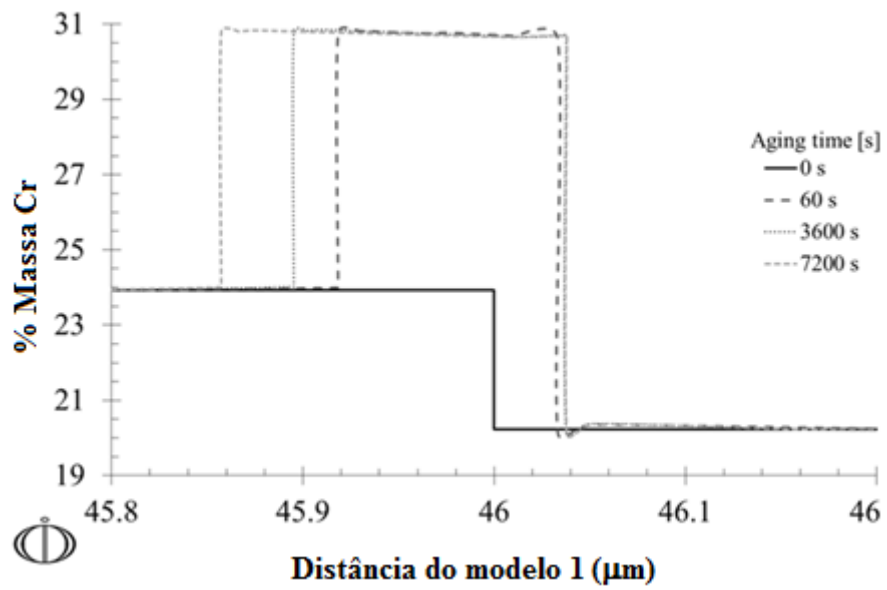
Ainda, os perfis dos principais elementos, Cr, Mo e Ni, foram obtidos para análise da evolução de sigma nas fases matriz. O perfil do Cr pode ser visto na Figura 14, como exemplo, obtido pelo mesmo software. Observa-se pelo gráfico o desenvolvimento do gradiente de Cr na ferrita ao mesmo tempo em que a fase sigma cresce, a qual somente se estabiliza após 7200s (MORAIS; MAGNABOSCO, 2017).

Figura 13 – Fração volumétrica de ferrita após envelhecimento a 940°C



Fonte: Autora “adaptado de” Morais e Magnabosco, 2017, p. 217

Figura 14 – Perfil de Cr após diferentes tempos de envelhecimento a 940°C



Fonte: Autora “adaptado de” Morais e Magnabosco, 2017, p. 217

3 METODOLOGIA

A metodologia empregada consiste primeiramente em simular o equilíbrio e as transformações de fases do aço UNS S32750, com auxílio dos softwares Thermo-Calc e DICTRA, respectivamente, e em seguida validar estes modelos através de experimentos reais em laboratório.

3.1 MATERIAL

O aço inoxidável superdúplex em estudo, UNS S32750, foi fornecido pela Villares Metals como uma barra laminada a quente, solubilizada a 1120°C por 1h30min e resfriada em água, de 82 mm de diâmetro e 3 m de comprimento, cuja composição química é apresentada na Tabela 3.

Tabela 3 – Composição química (% em massa) do aço em estudo

Cr	Ni	Mo	Mn	N	C	Si	Cu	W	Fe
25,17	6,88	3,61	0,60	0,25	0,01	0,40	0,58	0,69	Bal.

Fonte: Autora

Legenda: Composição química de análise realizada pela Villares Metals

3.2 SIMULAÇÕES DE EQUILÍBRIO

Realizou-se na primeira etapa do trabalho a simulação computacional do equilíbrio de fases com auxílio do software Thermo-Calc, usando as bases de dados termodinâmicos TCFE8 e SSOL4, obtendo-se a fração das fases em função da temperatura. Com isso, foi possível determinar a temperatura para tratamento térmico de solubilização correspondente a frações de 50% de ferrita e 50% de austenita, para ambas as composições químicas escolhidas do aço UNS S32750: reduzida (Tabela 4), apenas com os principais elementos de interesse, e completa (Tabela 5), desconsiderando-se o cobre e o silício, pois os testes iniciais mostraram que tais elementos impossibilitam que a simulação se efetive.

Tabela 4 – Composição química reduzida (% em massa) do aço em estudo

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

Fonte: Autora

Legenda: Composição química de análise realizada pela Villares Metals

Tabela 5 – Composição química completa (% em massa) do aço em estudo

Cr	Ni	Mo	Mn	N	C	W	Fe
25,17	6,88	3,61	0,60	0,25	0,01	0,69	Bal.

Fonte: Autora

Legenda: Composição química de análise realizada pela Villares Metals

Em seguida, realizou-se a simulação da cinética de transformação de fases com auxílio do software DICTRA, usando a base de dados termodinâmicos TCFE8 e a base de mobilidade atômica MOBFE3 para as simulações de composição química reduzida e completa, e a base de dados termodinâmicos SSOL4 e a de mobilidade atômica MOB2 para nova simulação de composição química completa, a fim de comparar os modelos entre si.

Para tal, partiu-se das temperaturas obtidas pelo Thermo-Calc onde tem-se 50% de cada fase para os 3 modelos, determinando a composição química de equilíbrio nesta temperatura para a ferrita e austenita. Em seguida, simulou-se a manutenção desta estrutura em 1250°C para avaliação da variação da fração de ferrita ao longo do tempo.

Os parâmetros inicialmente utilizados para a simulação computacional em DICTRA compreendem: tempo inicial $t=0$ e final $t=3$ h, largura inicial de 10 μm tanto para a ferrita quanto para a austenita, composição química dos elementos constante em tais fases determinadas na simulação de Thermo-Calc e número de pontos de cálculo dentro de cada fase igual a 50, vide Tabela 6. Os grãos de 10 μm foram estimados baseados em trabalhos anteriores deste mesmo grupo de pesquisa (MARAGONI, 2015). As simulações levaram, para cada modelo, aproximadamente 10h para serem completadas, utilizando-se um computador com processador do tipo Intel® Core™ i7-4770 CPU @ 3.40 GHz e 8 núcleos, apesar da simulação em DICTRA ocupar apenas um dos núcleos de processamento.

Tabela 6 – Parâmetros utilizados para a simulação do aquecimento para forjamento

	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
Bases de dados termodinâmicas	TCFE8	TCFE8	SSOL4
Bases de dados de mobilidade atômica	MOBFE3	MOBFE3	MOB2
Tempo de simulação	3h	3h	3h
Temperatura	1250°C	1250°C	1250°C
Modelo geométrico	Planar	Planar	Planar
Largura da ferrita	10 μm	10 μm	10 μm
Largura da austenita	10 μm	10 μm	10 μm
Composição química	Reduzida	Completa	Completa
N° de pontos de cálculo em cada fase	50	50	50

Fonte: Autora

Na segunda etapa do trabalho, realizou-se uma nova simulação computacional com tempo final maior, $t=1000\text{h}$, partindo-se de material que foi inicialmente tratado a 1250 °C por 3 horas, onde assume-se total equilíbrio atingido nesta temperatura, simulando o aquecimento até as temperaturas de retorno a fração volumétrica de 50% de ferrita e 50% de austenita para os modelos, com a finalidade de avaliar a variação da fração de austenita e a composição química destas fases, realizando-se o caminho inverso das simulações iniciais. Este tratamento é chamado de “solubilização para estrutura dúplex”.

Os parâmetros utilizados para a simulação computacional foram: tempo inicial $t=0$ e final $t=1000$ h, largura inicial de 28 μm para a austenita e 67 μm para a ferrita (descrevendo o crescimento de grão das fases após o aquecimento a 1250°C, o que será mostrado em Resultados e Discussão (item 4)), composição química dos elementos constante em tais fases determinadas na simulação de Thermo-Calc e mesmo número de pontos de cálculo, vide Tabela 7. Neste caso, as simulações se completaram em torno de 7 horas para cada modelo, utilizando-se o mesmo computador da simulação inicial.

Tanto na situação de aquecimento a 1250°C, quanto na de solubilização para estrutura dúplex, obteve-se a curva sigmoideal da fração volumétrica das fases em função

do tempo de manutenção na temperatura simulada, responsável pela escolha dos tempos reais de tratamento térmico experimental, descritos a seguir.

Tabela 7 – Parâmetros utilizados para a simulação do aquecimento para solubilização para estrutura dúplex

	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
Bases de dados termodinâmicas	TCFE8	TCFE8	SSOL4
Bases de dados de mobilidade atômica	MOBFE3	MOBFE3	MOB2
Tempo de simulação	1000h	1000h	1000h
Temperatura	1084°C	1115°C	1064°C
Modelo geométrico	Planar	Planar	Planar
Largura da ferrita	67 μm	67 μm	67 μm
Largura da austenita	28 μm	28 μm	28 μm
Composição química	Reduzida	Completa	Completa
N° de pontos de cálculo em cada fase	50	50	50

Fonte: Autora

3.3 TRATAMENTO TÉRMICO

Foram cortadas 21 amostras com 4 mm de espessura média a partir do material doado pela usina, as quais passaram por caracterização quantitativa da porcentagem de ferrita com auxílio do Ferritoscópio FISCHER, calibrado previamente com auxílio de padrões. Foram realizadas 20 medições por amostra.

Em seguida, 1 amostra foi separada para análise da condição original, como recebida da usina, e as demais 20 amostras foram separadas para tratamentos que correspondem às diferentes situações simuladas, visando suas validações. Logo, 14 destas amostras foram aquecidas a 1250°C em diferentes tempos. Outras 6 amostras foram primeiro aquecidas a 1250°C por 3 horas, visando a obtenção do equilíbrio nesta temperatura, para em seguida serem aquecidas a 1088 °C por diferentes tempos. Detalhes destes tratamentos estão na Tabela 8.

Tabela 8 – Resumo dos tratamentos térmicos realizados

Número de amostras	Aquecimento	Tempo	Fase avaliada
14	1250°C	36s, 60s, 2 min, 30 min, 40 min	Ferrita
06	1250°C	3h	-
	1088°C	2 min, 30 min, 3h, 12h, 36h	Austenita

Fonte: Autora

Os tempos correspondem a diferentes frações de ferrita e austenita, escolhidos a partir das curvas sigmoidais simuladas em Resultados e Discussão (item 4). A temperatura de 1088°C é a média das 3 temperaturas de solubilização para estrutura dúplex encontradas para os modelos de simulações, como também serão apresentadas no item 4, posteriormente.

Os tratamentos térmicos foram realizados em forno tubular Combustol e interrompidos por resfriamento em água.

3.4 ANÁLISE MICROESTRUTURAL

As amostras tratadas termicamente tiveram suas faces lixadas com a lixa de granulometria 80 mesh e foram cortadas ao meio, descartando-se a borda e embutindo a amostra de interesse em baquelite, com seção longitudinal para análise.

Depois, foram lixadas em lixas de granulometria 200, 300, 400 e 600 mesh e polidas em pasta de diamante de granulação de 6 µm e 1 µm, utilizando-se álcool etílico como lubrificante.

Com a finalidade de revelar a ferrita e austenita presentes no AISD em questão, as amostras foram atacadas quimicamente, durante 40s, utilizando-se o reagente Beraha modificado, cuja composição é de 300 mL de solução 10% de ácido clorídrico (HCl) com adição de 3g de metabissulfito de potássio e 6g de bifluoreto de amônio, o qual promove coloração seletiva entre ferrita e austenita, permitindo a distinção entre as duas fases.

A amostra original e outra tratada por 3h a 1250°C foram atacadas eletroliticamente com 6V em corrente contínua, durante 40s, utilizando-se ácido oxálico

como reagente, visando revelar os contornos de grãos, facilitando a medida do seu tamanho médio manualmente pelo método dos interceptos lineares.

A fração volumétrica de ferrita nas amostras solubilizadas sem ataque químico foi obtida, primeiramente, através do ferritoscópio FISCHER, previamente calibrado com os padrões inclusos, obtendo-se 20 medições por toda a amostra. Em seguida, foi feita a análise por estereologia quantitativa a partir de imagens de microscopia óptica, utilizando-se o software AnalySIS docu, das amostras atacadas com o reagente Behara modificado. Foram realizadas medições em 20 campos aleatórios da amostra com 100 vezes de aumento.

Todas as amostras solubilizadas foram submetidas à análise metalográfica no Microscópio Óptico Olympus obtendo-se micrografias também com 100 vezes de aumento.

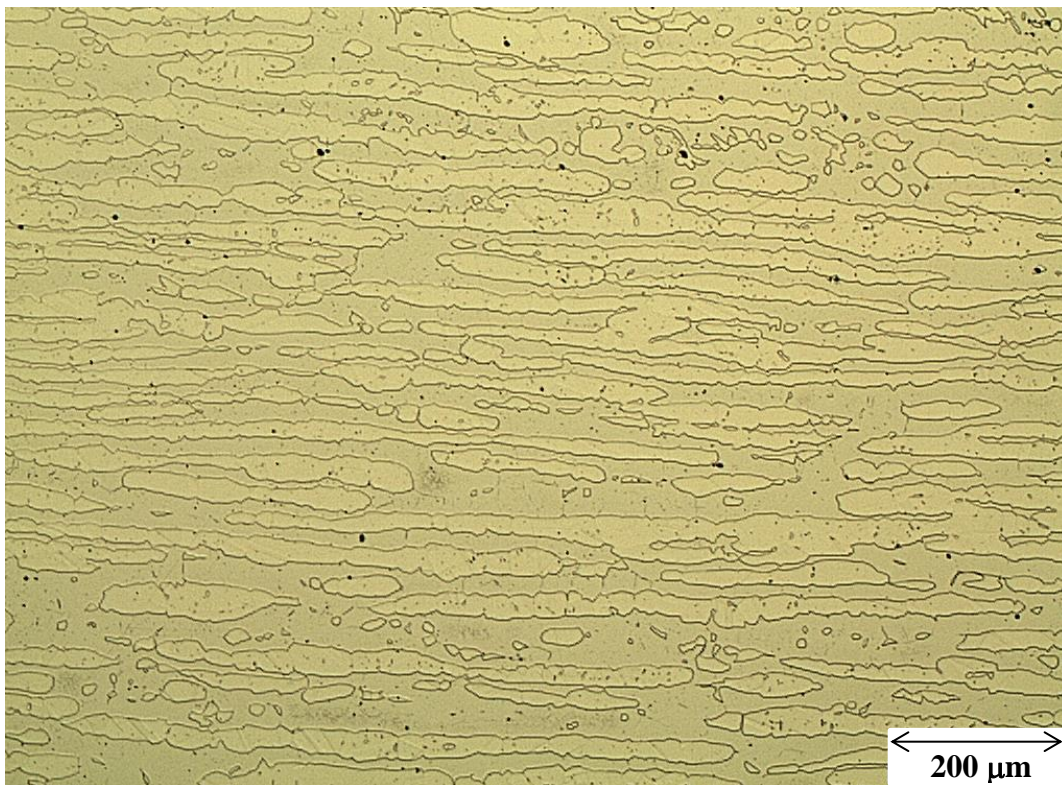
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos seguem a mesma sequência metodológica de apresentação, divididos em modelamento computacional e validação experimental, com as pertinentes discussões e comparações.

4.1 CARACTERIZAÇÃO DA MICROESTRUTURA ORIGINAL

Após preparação metalográfica da amostra original descrita em Análise Microestrutural (item 3.4) obteve-se a micrografia da Figura 15, utilizada para calcular manualmente o tamanho de grão pelo método dos interceptos lineares, resultando em 13 μm para a ferrita e 14 μm para a austenita, o que comprova equilíbrio no sistema e aproxima-se dos tamanhos de grãos estimados inicialmente de 10 μm para cada fase. Além disso, os ensaios por ferritoscópico e estereologia quantitativa comprovam que a amostra encontra-se na condição dúplex, ou seja, com 50% de cada fase.

Figura 15 – Microscopia óptica da amostra original, ataque com ácido oxálico



Fonte: Autora

4.2 MODELAMENTO COMPUTACIONAL A 1250°C

A partir das simulações de equilíbrio e da cinética de transformação de fases no aquecimento a 1250°C, previamente descritas em Metodologia (item 3.2), foram obtidos os resultados a seguir para cada modelo e a evolução da ferrita ao longo do tratamento térmico nesta temperatura.

4.2.1 Modelo 1: Análise da simulação realizada com composição química reduzida, utilizando-se as bases de dados TCFE8 e MOBFE3 a 1250°C.

Pelo diagrama de fases do aço inoxidável UNS S32750 da Figura 16, nota-se que a temperatura liquidus é de 1470°C, ou seja, tem-se apenas fase líquida, enquanto que com a queda da temperatura a quantidade desta começa a reduzir com a solidificação da fase ferrítica, cuja estrutura é cúbica de corpo centrado (BCC_A2). Em temperaturas mais baixas, entre 1405°C e 1326°C, tem-se a ferrita como uma única fase sólida no sistema. Abaixo de 1326°C inicia-se a formação da fase austenítica, provavelmente nos contornos de grãos de ferrita, cuja estrutura é cúbica de face centrada (FCC_A1), de modo que em 1084°C existe 50% de α e 50% de γ .

Considerando através do gráfico da Figura 16 que em 1084°C existe 50% de cada fase, e tendo-se a composição das fases ferrita e austenita nesta temperatura, realizou-se a simulação em DICTRA do aquecimento do aço até a temperatura escolhida de 1250°C, a fim de provocar e analisar o aumento da fração de ferrita, o qual se deu até 70%, gerando-se o gráfico da Figura 17. Observa-se que o crescimento da fase é sigmoideal como já discutido na revisão bibliográfica.

Figura 16 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8 a 1250°C

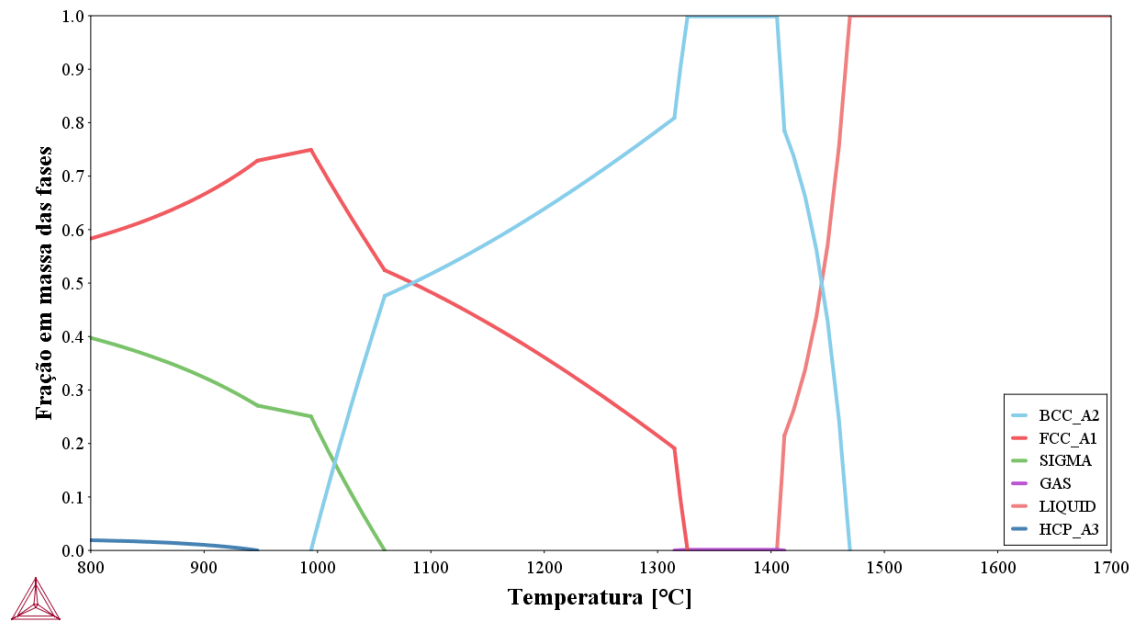
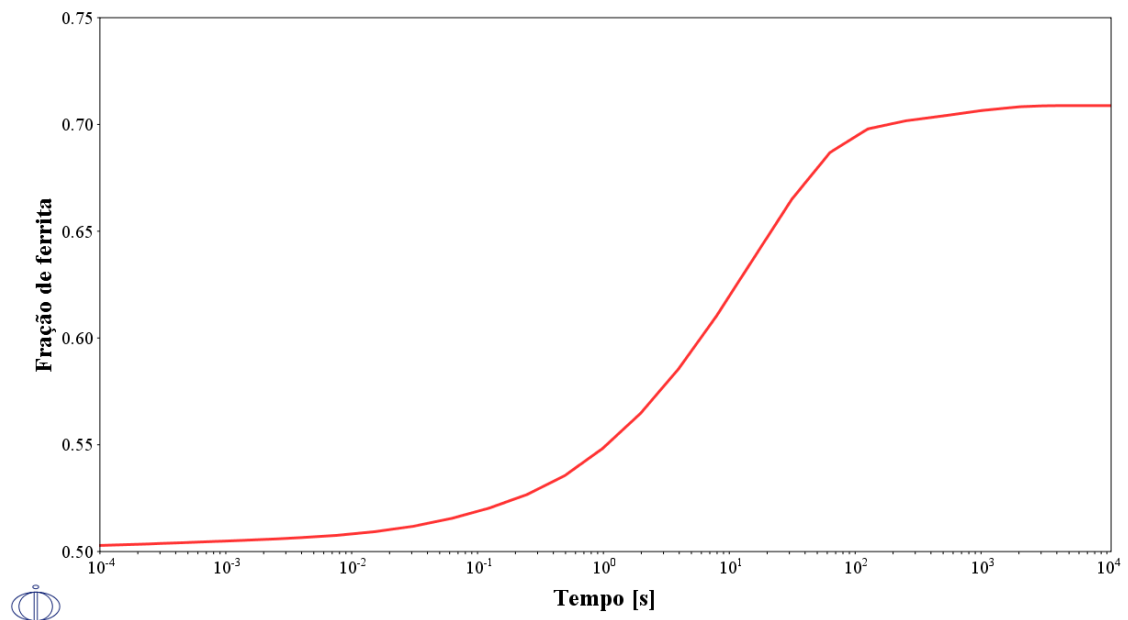


Figura 17 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Sabendo-se que durante as transformações de fase no estado sólido os elementos de liga têm suas frações variadas de acordo com a fase em que se encontram, foram

obtidos os perfis de composição em função da distância do modelo simulado ao longo do tempo de tratamento térmico.

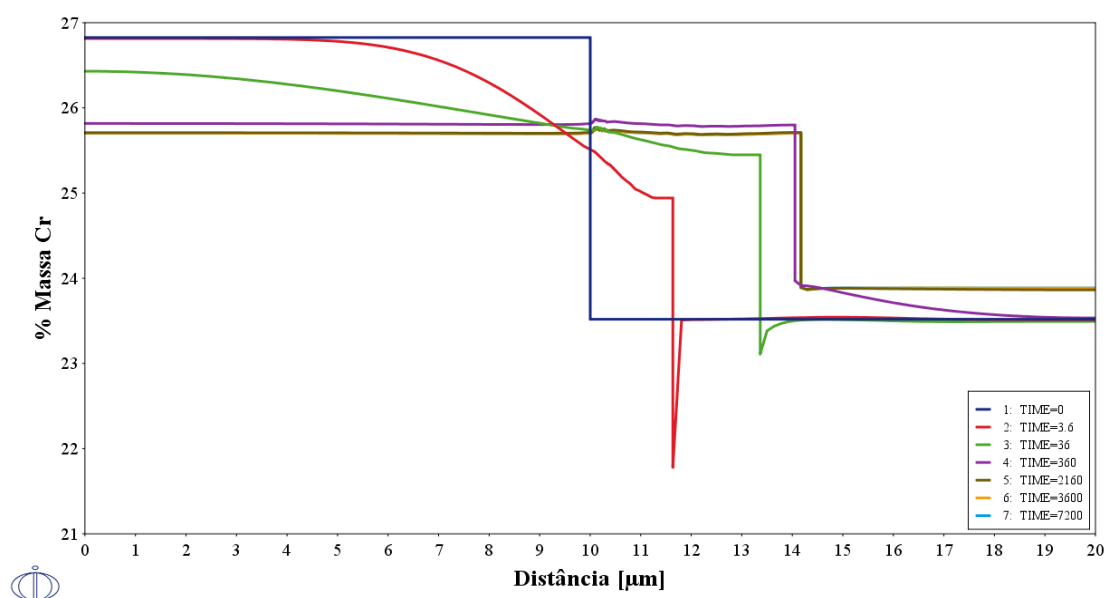
Nas simulações que serão apresentadas, nota-se que para um tempo de simulação $t=0$, tem-se uma linha vertical representando a interface entre a ferrita e a austenita exatamente no meio do modelo indicando a presença de 50% de ferrita e 50% de austenita, um patamar à esquerda representando o perfil do elemento na ferrita e um patamar à direita representando o perfil do elemento na austenita.

Primeiramente, analisando-se o perfil de Cr em função da distância do modelo apresentado na Figura 18, nota-se que a fase α avança por difusão em direção a fase γ , uma vez que a interface α/γ se desloca para direita e a fração inicial de Cr na ferrita cai de 26,8% para 25,6% e aumenta de 23,5% para 23,7% na austenita após 3h de simulação do tratamento térmico.

Em suma, observa-se que o equilíbrio só é atingido após 2160s de tratamento térmico, pois a porcentagem em massa de Cr torna-se constante nas duas fases.

Figura 18 – Variação da % em massa de Cr em função da distância para o modelo 1:

Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBF3 a 1250°C



Fonte: Autora

Diferentemente do Cr, o comportamento do Mo observado na Figura 19 indica diluição do elemento em ambas as fases, visto que a porcentagem inicial de 4,42% de Mo em α e 2,80% em γ reduzem ao longo do tempo. Isso se deve ao fato de que além do Mo

ser um elemento substitucional por possuir raio atômico 0,136 nm, apresentando lenta difusão, a quantidade de α formada é elevada. Logo, a quantidade de Mo que sai de α não é suficiente para aumentar a quantidade da γ .

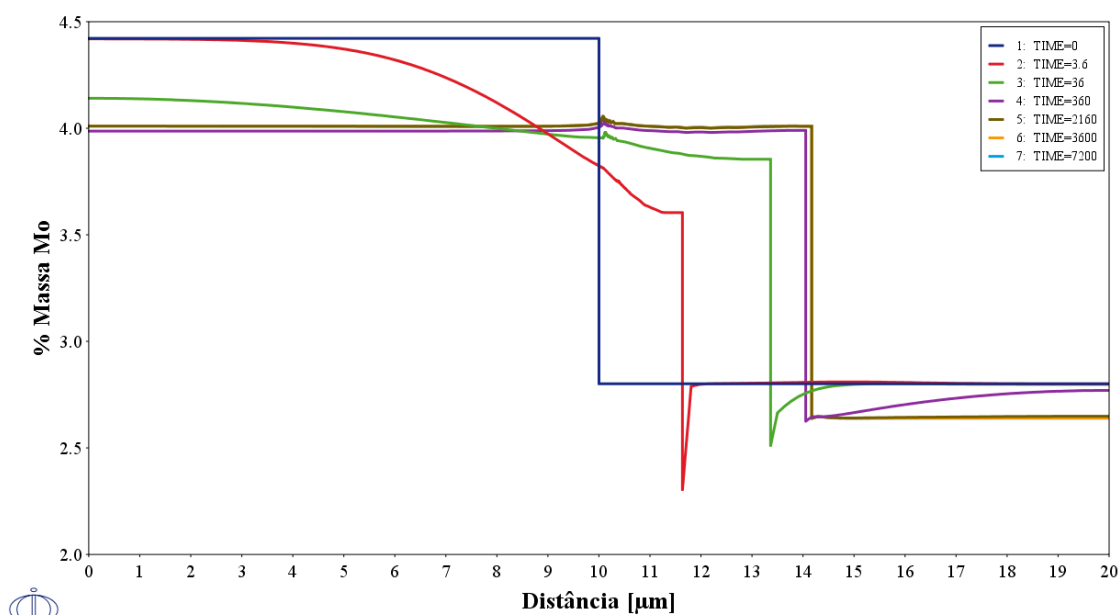
Semelhante ao comportamento do Mo, em sentido inverso, o níquel tem sua porcentagem em massa acrescida nas duas fases, as quais foram de 5,22% para 6,17% em α e 8,53% para 8,82% em γ , vide Figura 20. γ . Percebe-se mais uma vez que a partir de 2160s o sistema entra em equilíbrio tanto para o Cr quanto para o Mo.

Analisando-se a Figura 21, observa-se que a fração inicial de N em α é de 0,04% e 0,46% em γ , cuja variação em massa apresentou-se mais sutil se comparado com os demais elementos acima, mantendo-se praticamente constante em α e enriquecendo em apenas 0,2 pontos percentuais em γ , totalizando-se 0,66% ao final do tratamento térmico. Logo, pode-se afirmar que o N se comporta como o Ni, pois enriquecem em ambas as fases, mesmo que em pequenas proporções.

Além disso, percebe-se que o equilíbrio do sistema é atingido aos 360s, ou seja, antes dos demais elementos químicos analisados, provavelmente pelo fato de que o N de raio atômico 0,065 nm, e diferentemente do Cr, Mo e Ni, ser intersticial, o que lhe confere facilitado processo de difusão.

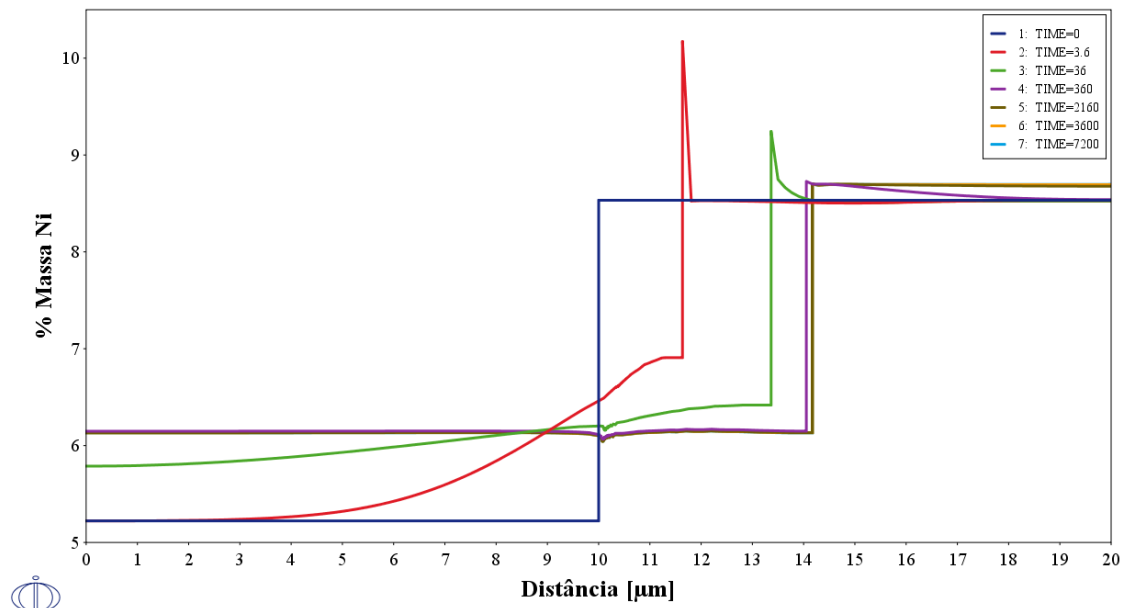
Figura 19 – Variação da % em massa de Mo em função da distância para o modelo 1:

Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



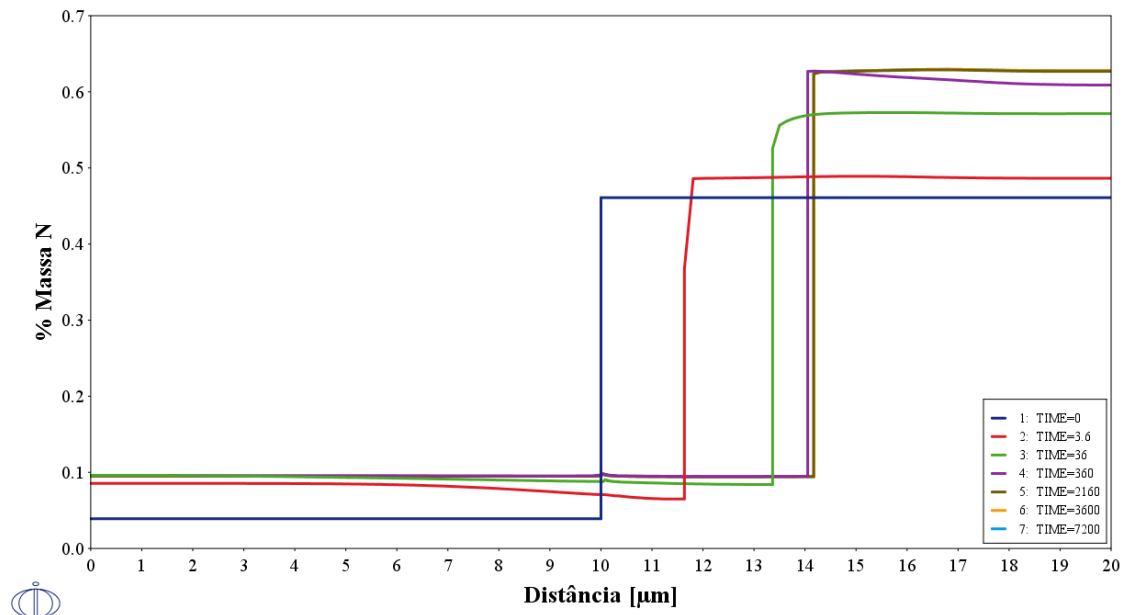
Fonte: Autora

Figura 20 – Variação da % em massa de Ni em função da distância para o modelo 1:
Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Fonte: Autora

Figura 21 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 1:
Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Fonte: Autora

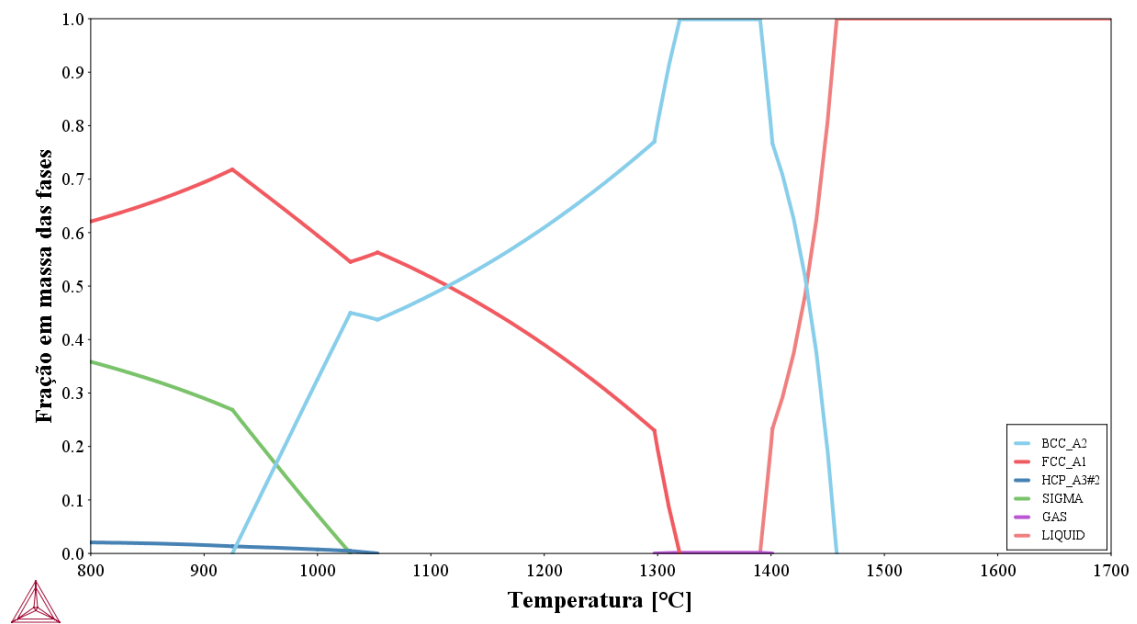
4.2.2 Modelo 2: Análise da simulação realizada com composição química completa, utilizando-se as bases de dados TCFE8 e MOBFE3 a 1250°C.

A fim de analisar as possíveis diferenças a respeito dos diagramas de fases e dos perfis dos elementos químicos para diferentes tempos de tratamento térmico entre as simulações dos modelos 1 e 2, foram obtidos os gráficos abaixo com a composição completa utilizando-se as mesmas bases de dados: TCFE8 e MOBFE3.

Pelo diagrama de fases da Figura 22 é possível notar que até aproximadamente 1458°C tem-se apenas fase líquida, enquanto que com a queda da temperatura a quantidade desta começa a reduzir com a nucleação da fase ferrítica. Já em temperaturas entre 1390°C e 1320°C tem-se a ferrita como única fase sólida e abaixo de 1320°C inicia-se a formação da fase austenítica, de modo que em 1115 °C existe 50% de cada fase. Comparando-se com o diagrama do modelo 1, Figura 16, percebe-se que não somente há diferença no intervalo de temperatura em que se tem apenas ferrita, a qual é menor para a composição química completa, como a temperatura na qual coexistem 50% de ferrita e 50% de austenita também, apresentando-se maior para o modelo 2. Isso se deve, provavelmente, à quantidade de elementos que foi acrescida nesta simulação, alterando a partição de elementos entre as fases e seus campos de equilíbrio.

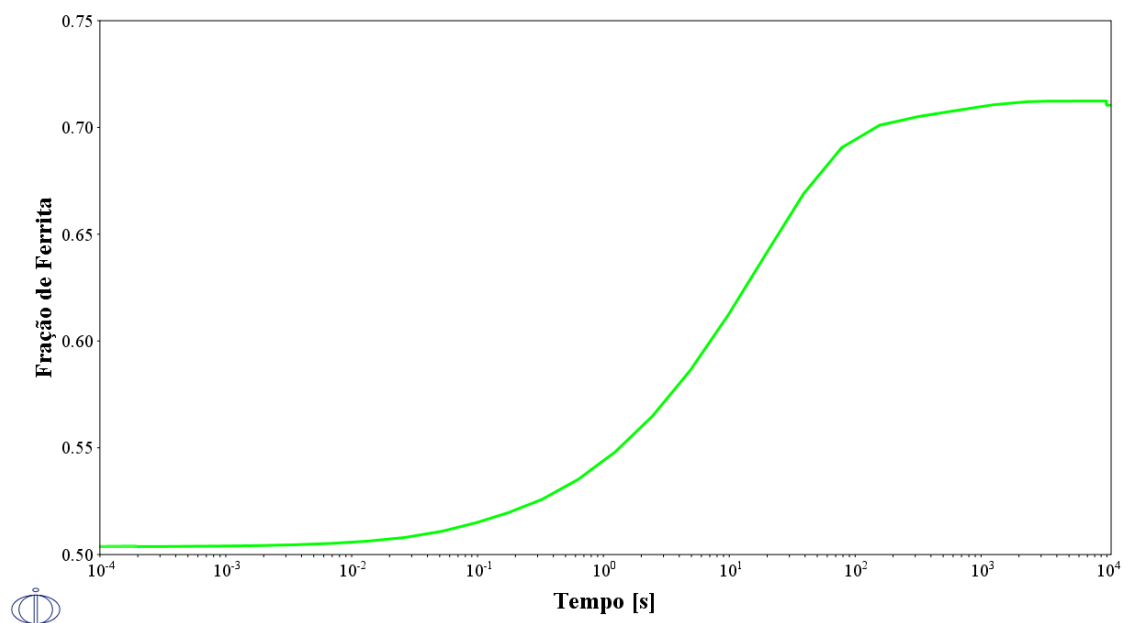
Seguindo o mesmo raciocínio, elevou-se a temperatura de 1115°C para 1250°C no DICTRA, provocando o aumento da fração de ferrita até 72%, vide gráfico da Figura 23. A diferença entre os modelos 1 e 2 é mínima e será discutida posteriormente, ao final do item 4.2.4.

Figura 22 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8 a 1250°C



Fonte: Autora.

Figura 23 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Fonte: Autora.

O perfil de Cr apresentado na Figura 24 é semelhante à simulação de composição química reduzida da Figura 18, a fração inicial do elemento de 27,1% em α reduz para

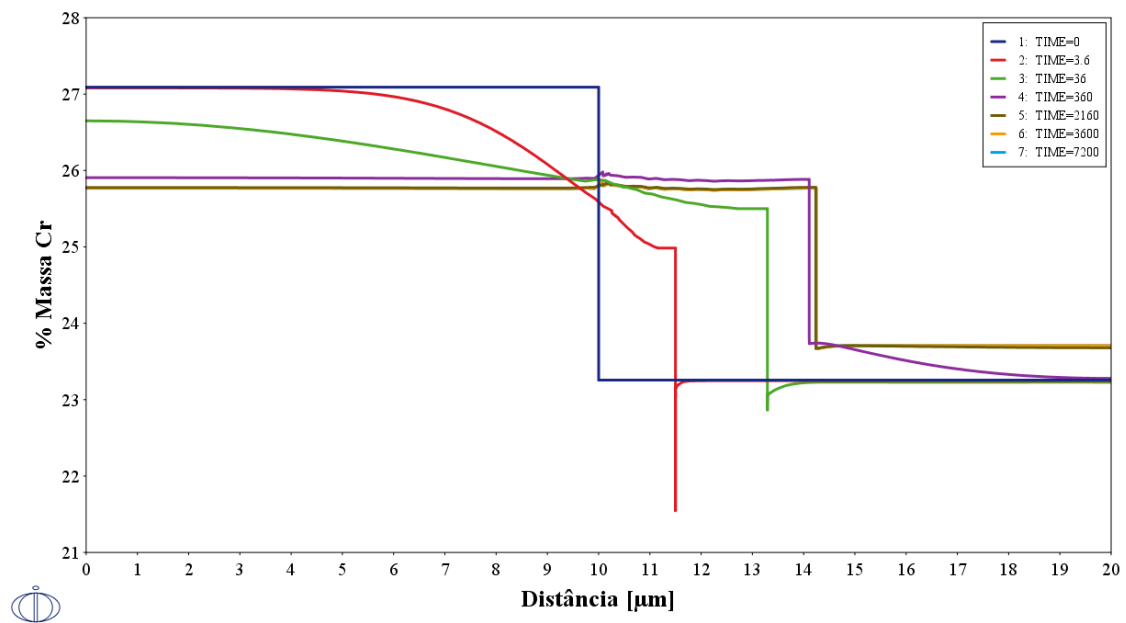
25,8% pois difunde-se para γ , a qual é enriquecida em 0,5 pontos percentuais, ou seja, tem seu valor aumentado de 23,2% para 23,7% ao final do tratamento térmico.

Para o Mo, exatamente como ocorre no modelo 1, Figura 19, as frações iniciais de 4,38% em α e 2,84% em γ , são empobrecidas em Mo, restando 3,97% e 2,64%, respectivamente, após atingir o equilíbrio em 2160s, conforme pode ser visto na Figura 25.

O Ni, assim como na simulação do modelo 1, Figura 20, enriquece tanto na ferrita quanto na austenita, apresentando valores iniciais de 5,12% em α e 8,64% em γ , e finais de 6,11% e 8,83%, respectivamente. Além disso, após 2160s o equilíbrio também é atingido, como se pode observar na Figura 26 e semelhante ao modelo 1.

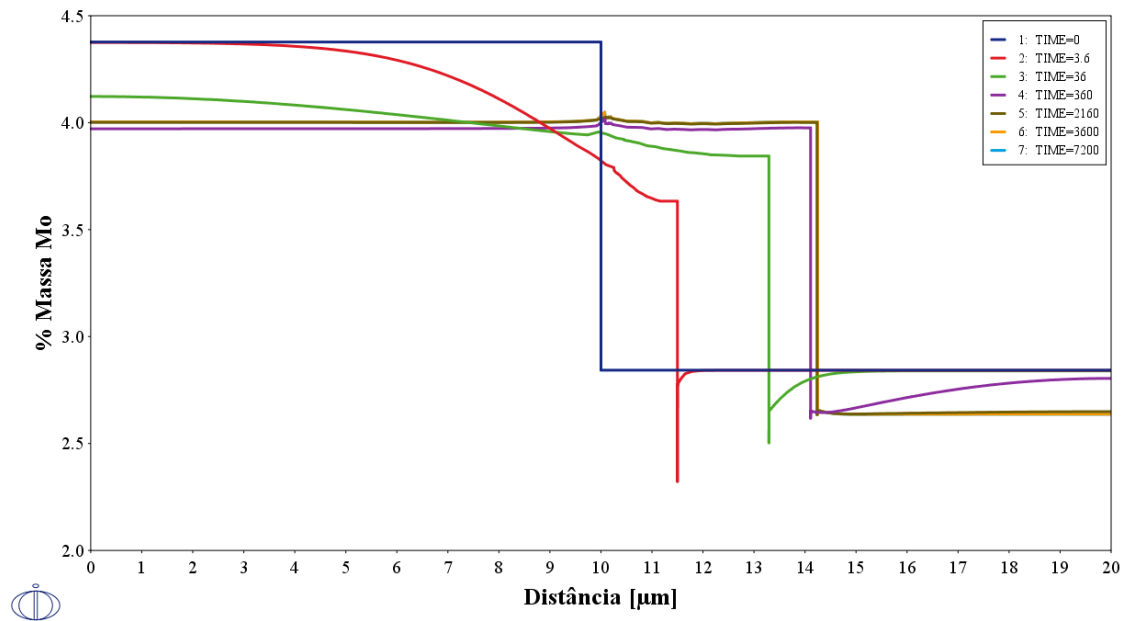
Figura 24 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 2:

Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



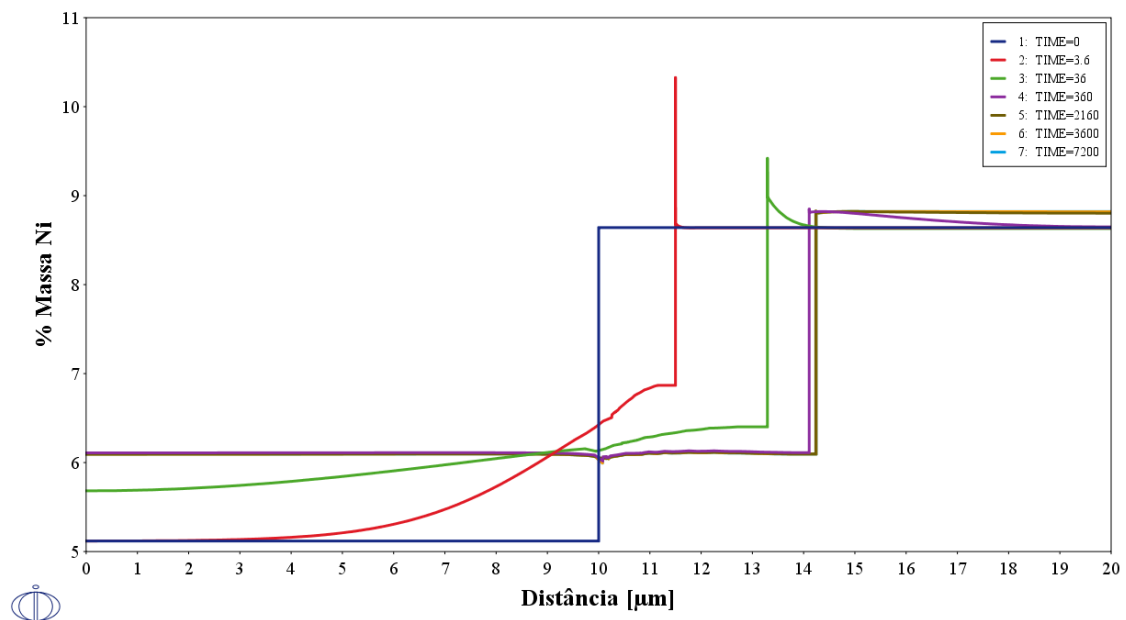
Fonte: Autora

Figura 25 – Variação da % em massa do Mo em função da distância para o modelo 2:
Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Fonte: Autora

Figura 26 – Variação da % em massa do Ni em função da distância para o modelo 2:
Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C



Fonte: Autora

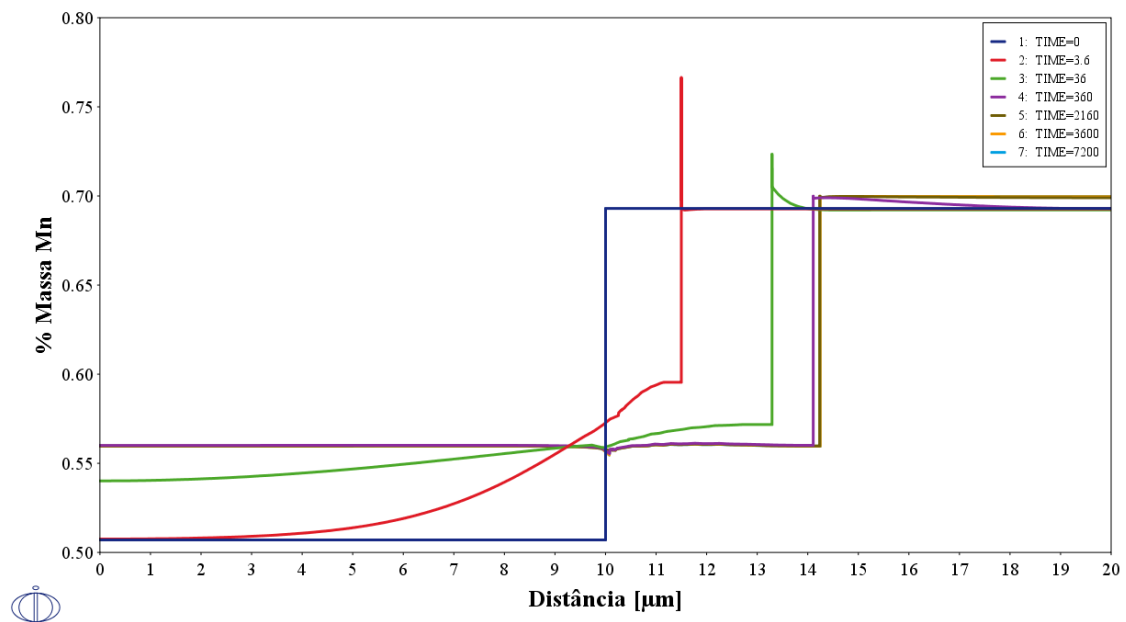
Em relação aos perfis do manganês (Mn) e do N, apresentados na Figura 27 e na Figura 28, respectivamente, é possível observar que as porcentagens em massa destes

elementos são mínimas tanto na ferrita quanto na austenita, sendo 0,51% e 0,69% respectivamente para o Mn e de 0,06% e 0,44% para o N, onde ambos apresentam um enriquecimento sutil na porcentagem em massa nas duas fases ao longo do tratamento térmico quando comparados aos demais elementos.

Já analisando-se o gráfico da Figura 29, percebe-se que o teor de tungstênio (W) de 0,85% em α empobrece ao longo do tratamento térmico, resultando em 0,75%, porém o teor inicial de 0,53% em γ não enriquece proporcionalmente e mantém-se praticamente o mesmo, o que indica que ocorreu diluição do elemento na fase ferrítica.

Figura 27 – Variação da % em massa do Mn em função da distância para o modelo 2:

Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBF3 a 1250°C



Fonte: Autora

Figura 28 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 2:
Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C

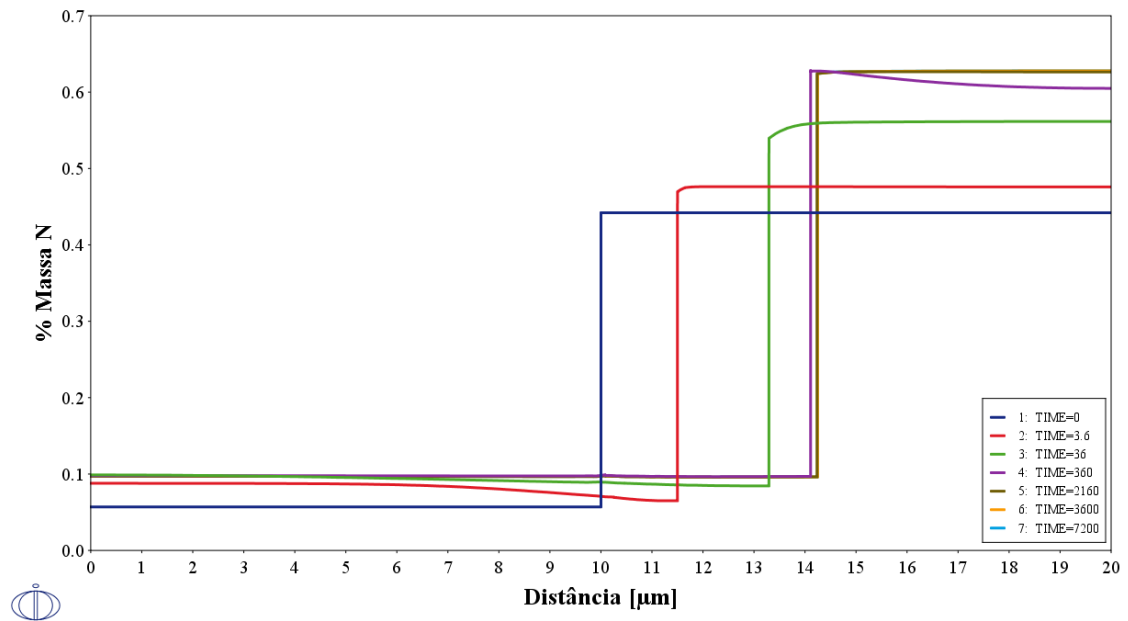
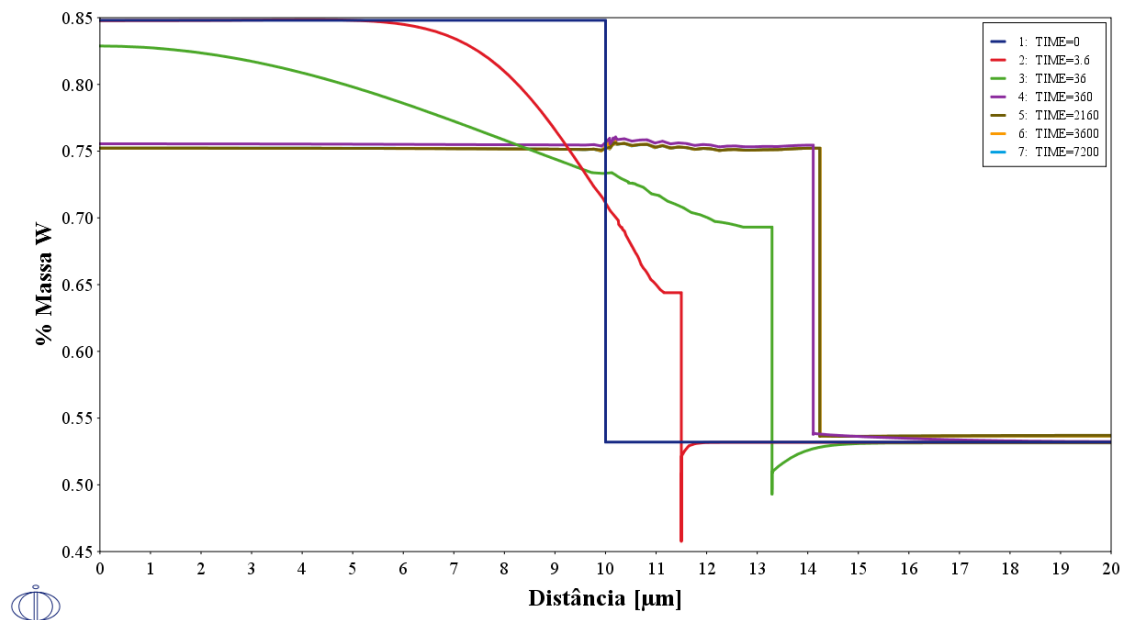


Figura 29 – Variação da % em massa do W em função da distância para o modelo 2:
Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C

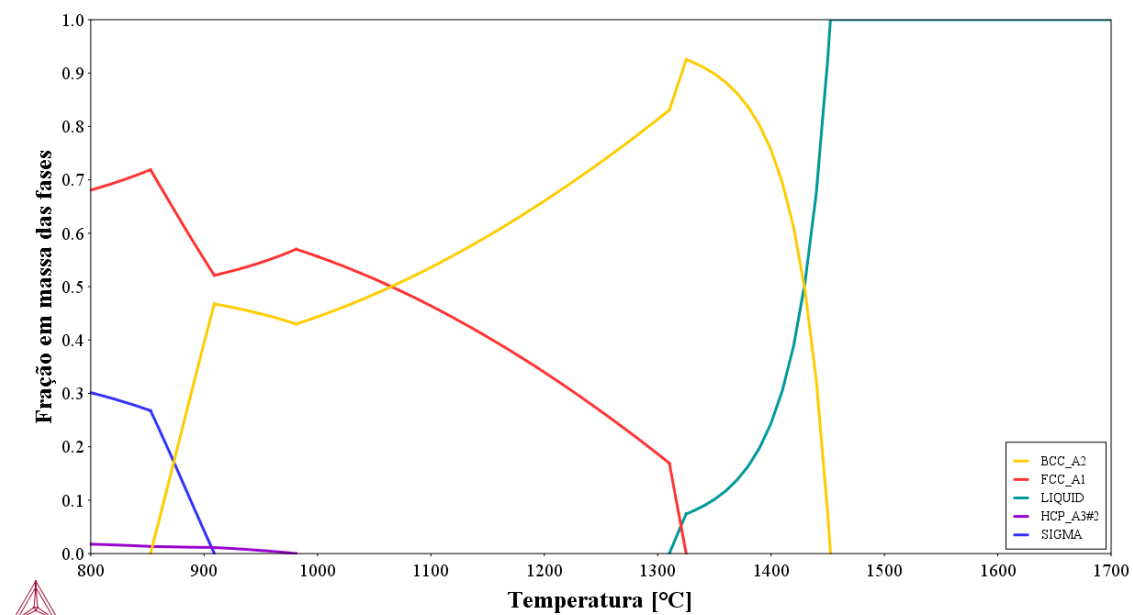


4.2.3 Modelo 3: Análise da simulação realizada com composição química completa, utilizando-se as bases de dados SSOL4 e MOB2 a 1250°C.

Observando-se o diagrama de fases da Figura 30, nota-se uma grande diferença para os demais modelos, visto que não há uma faixa de temperatura onde se tem apenas ferrita, portanto entre 1452°C e 1325°C há ferrita nucleando na fase líquida. Abaixo de 1325°C inicia-se o processo de nucleação da fase austenítica na ferrita, até que em 1064°C obtém-se 50% de cada fase.

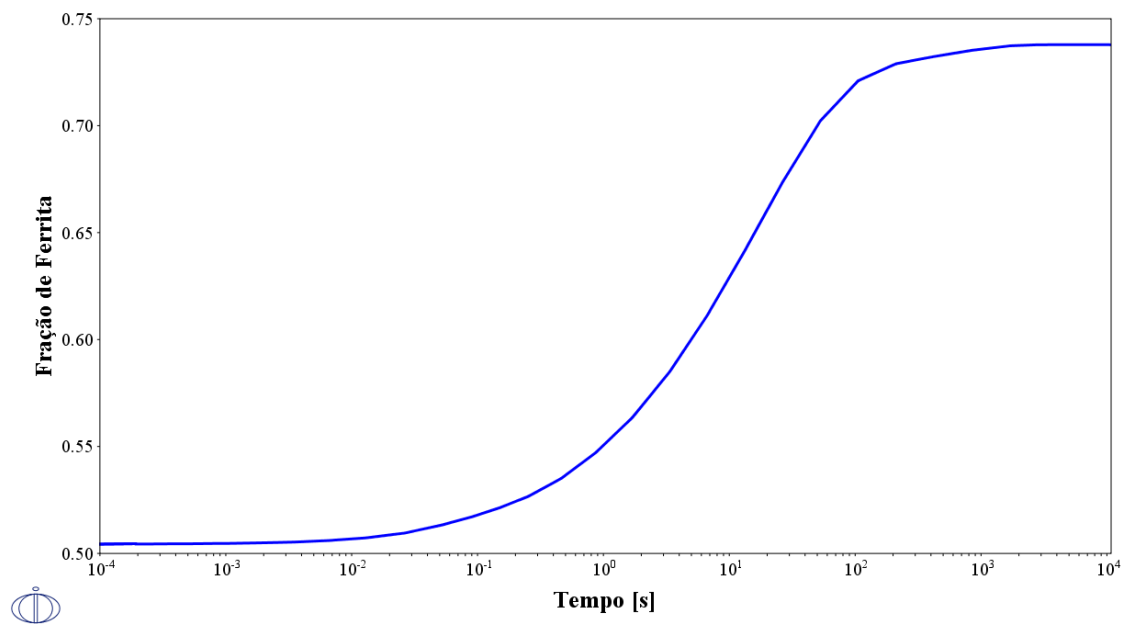
Considerando que em 1064°C existe 50% de cada fase, realizou-se a simulação com a composição química de ferrita e austenita nesta temperatura para a simulação do aquecimento do aço até 1250°C também para o modelo 3, provocando um aumento sigmoidal até 74% de ferrita, vide o gráfico da Figura 31.

Figura 30 – Diagrama de fases em função da temperatura para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4 a 1250°C



Fonte: Autora.

Figura 31 – Fração de ferrita em função do tempo para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C



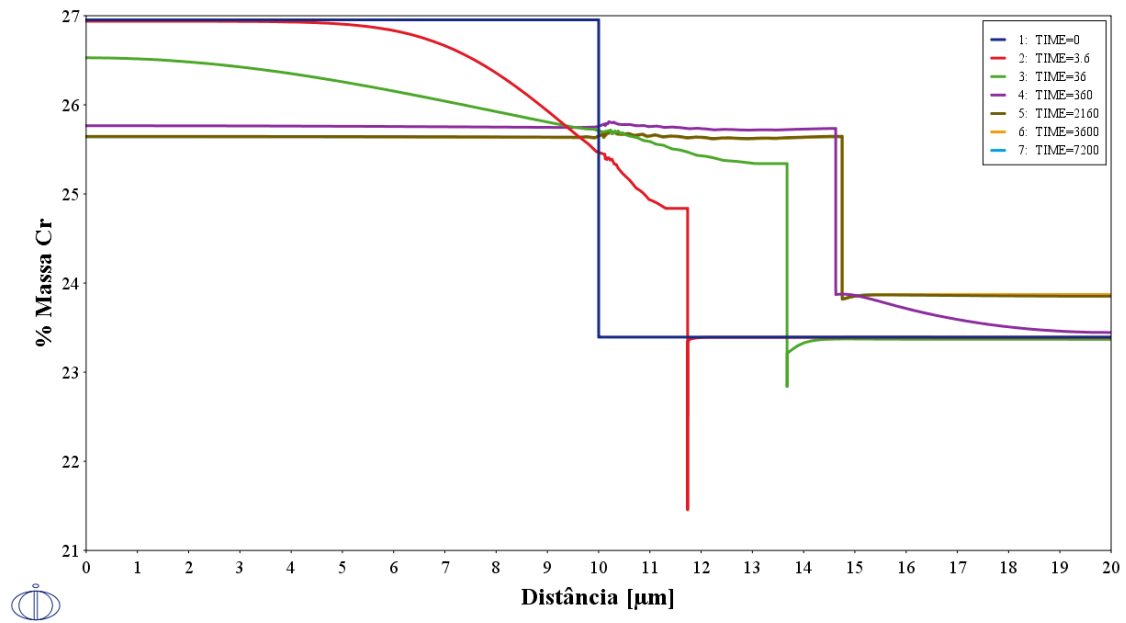
Fonte: Autora

Comparando-se o perfil de Cr do modelo 3, Figura 32, com o do modelo 2, Figura 24, observa-se que apesar de apresentarem as mesmas quantidades iniciais e finais de ferrita e austenita, a interface α/γ do modelo 3 caminhou aproximadamente 0,5 μm para a direita após 3,6s, indicando que a difusão ocorreu mais rapidamente.

Quanto ao perfil de Mo da Figura 33, a fração inicial de 4,52% é maior na ferrita em relação ao modelo 2, Figura 25, enquanto que na austenita, apresenta-se 0,5% menor, sendo de 2,66%, onde ambas as fases são empobrecidas no elemento ao longo do tempo de tratamento térmico, resultando em 4% na α e 2,49% na γ .

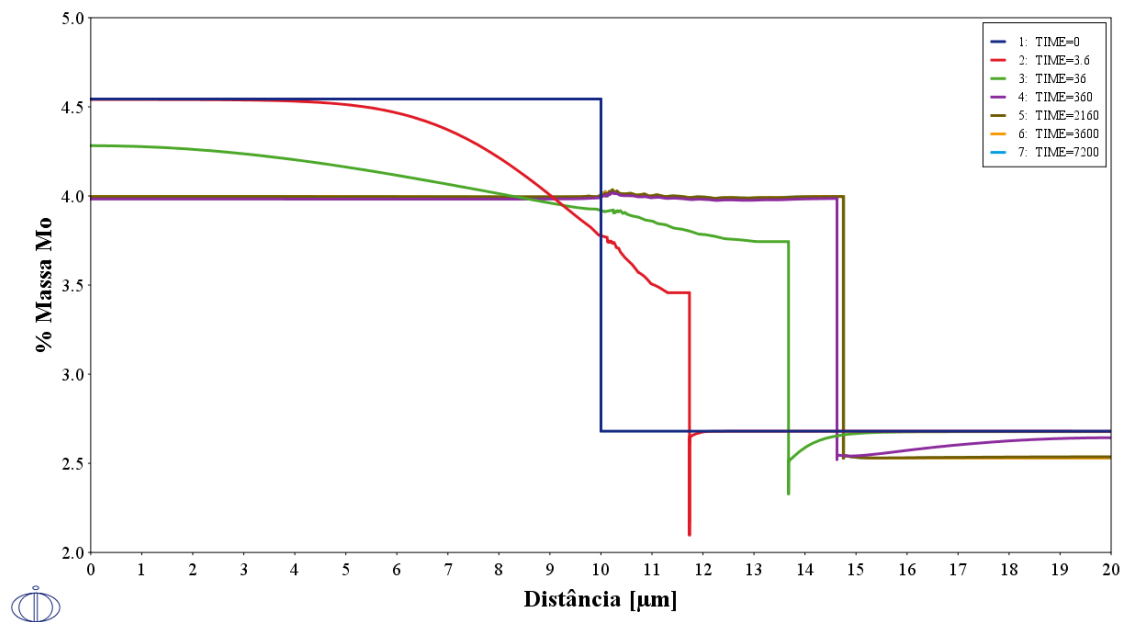
Semelhante ao Cr, as porcentagens em massa de Ni, Figura 34, não se alteram do modelo 2 para o 3, porém a interface α/γ também caminha 0,4 μm para a direita a partir de 3,6s.

Figura 32 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C



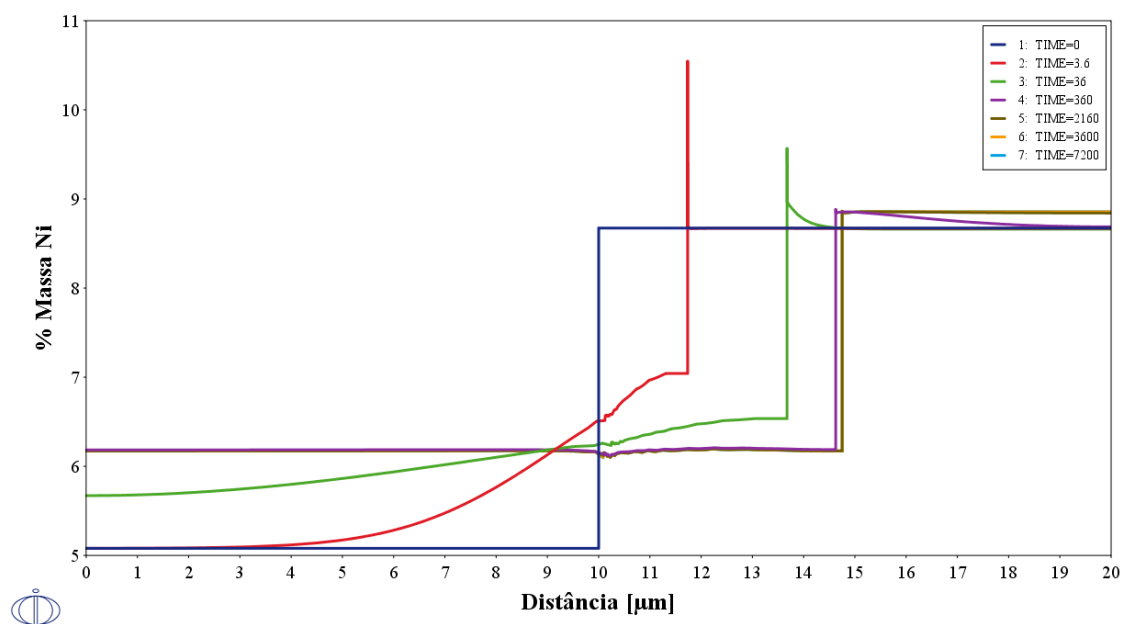
Fonte: Autora

Figura 33 – Variação da % em massa do Mo em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C



Fonte: Autora

Figura 34 – Variação da % em massa do Ni em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C



Fonte: Autora

Pela análise do perfil de Mn da Figura 35, percebe-se que com a alteração das bases de dados este apresentou-se exatamente ao contrário, visto que no modelo 2, Figura 27, a fase α é enriquecida em Mn ao passo que a fase γ empobrece no elemento. Já para o modelo 3, a fase α que avança em direção a γ , deslocando a interface α/γ 0,6 μm para a direita a partir de 3,6 segundos, de modo que a fase α empobreça de 0,55% para 0,518% em Mn, enquanto que a fase γ enriquece de 0,517% a 0,58% e, portanto, apresentando uma maior e mais lenta variação em relação ao modelo 2.

Assim como ocorreu ao Cr e Ni, as porcentagens em massa de N, Figura 36, mantém-se as mesmas do modelo 2, Figura 28, deslocando apenas a interface α/γ 0,5 μm para a direita.

Por fim, analisando-se o perfil de W, Figura 37, e comparando-se com o do modelo 2, Figura 29, percebe-se que tanto a porcentagem inicial e final do elemento na ferrita quanto na austenita são maiores que no modelo 2, apresentando-se inicialmente 0,855% em α e 0,65% em γ e ao final 0,81% em α e 0,56% em γ . Além disso, a interface α/γ deslocou-se 0,6 μm para a direita.

Figura 35 – Variação da % em massa do Mn em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C

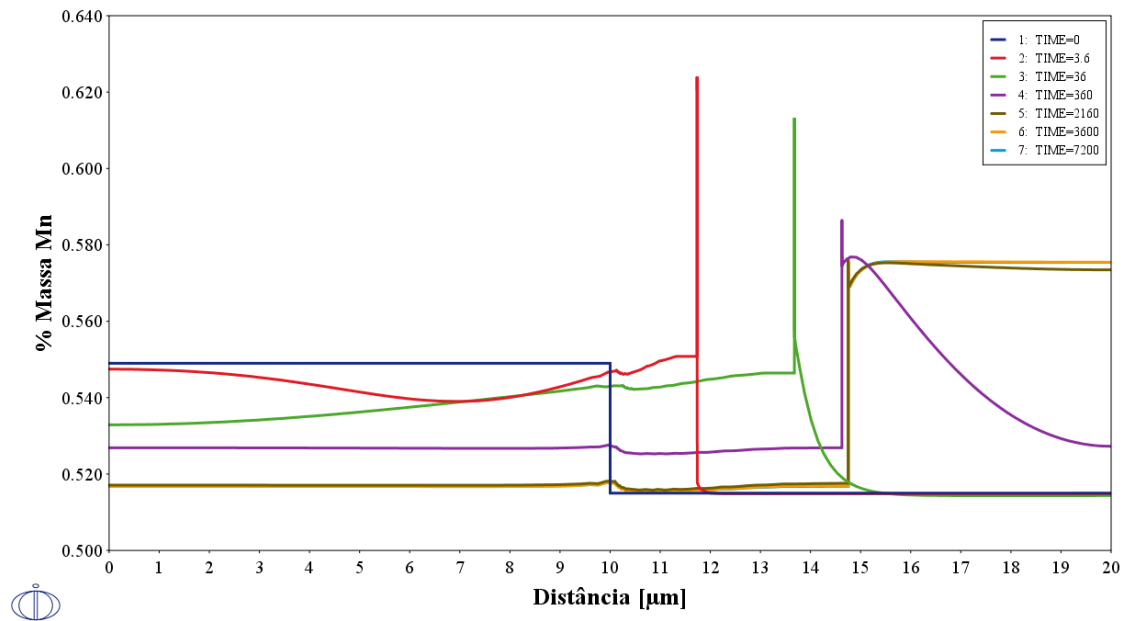


Figura 36 – Variação da % em massa do N em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C

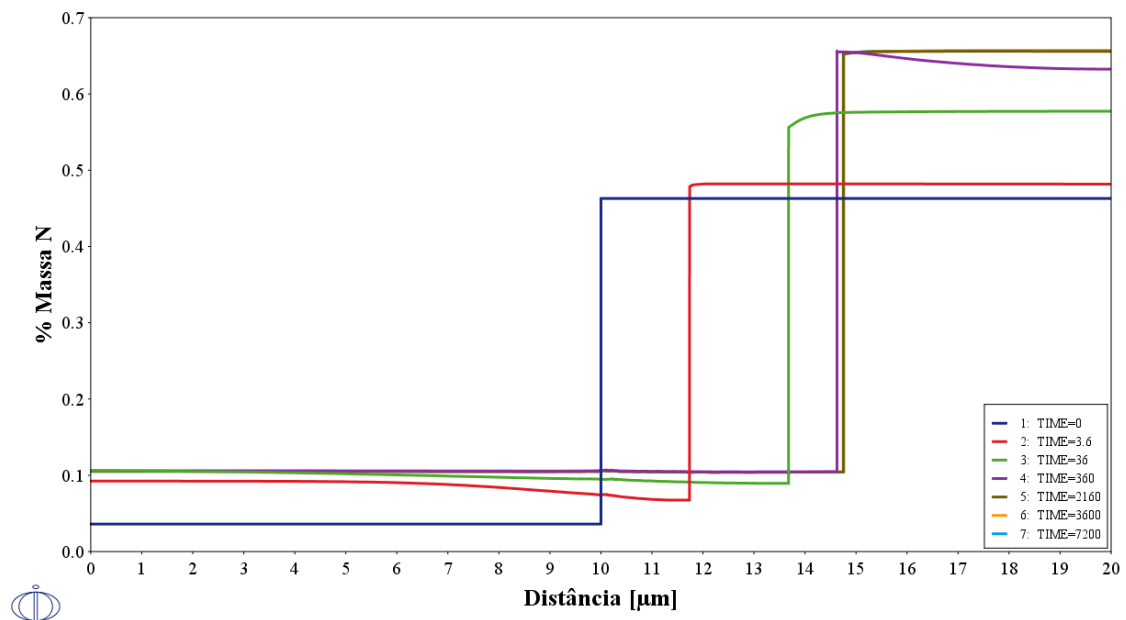
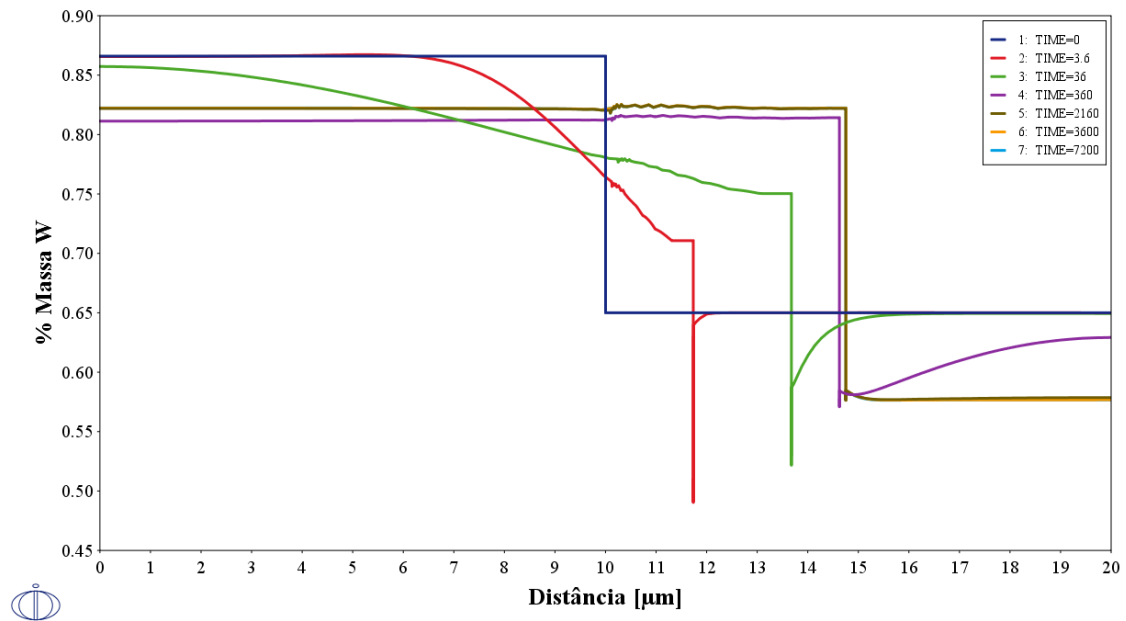


Figura 37 – Variação da % em massa do W em função da distância para o modelo 3:
Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1250°C



Fonte: Autora

4.2.4 Comparação da evolução de ferrita em função do tempo para os modelos.

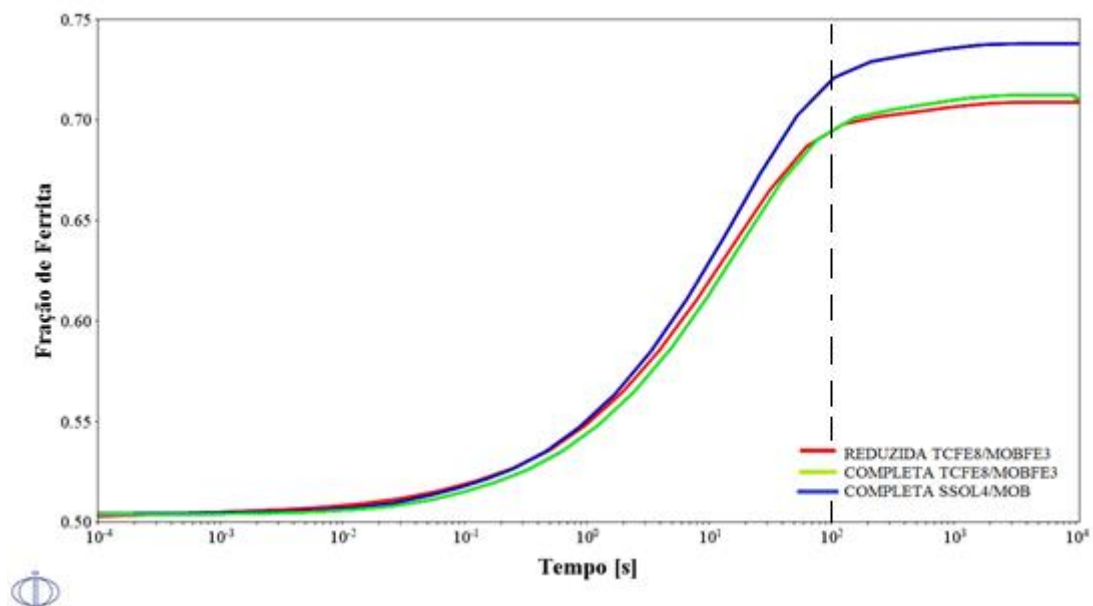
Comparando-se o crescimento sigmoidal de ferrita nos três modelos, Figura 38, percebe-se que a simulação completa feita com as bases SSOL4/MOB2 apresenta sempre uma quantidade de ferrita maior em relação às demais para um mesmo tempo. Já a simulação completa utilizando-se as bases TCFE8/MOBFE3 é maior em apenas 1% em relação à composição química reduzida de mesmas bases apenas a partir de 80s.

Isso indica que até 80s, uma simulação cuja composição química possui menos elementos, demonstra facilitar o aumento da fração de ferrita durante o aquecimento do aço inoxidável em questão.

Quanto às diferenças na fração volumétrica de ferrita obtida, pode-se afirmar que a mesma é desprezível entre as curvas completa e reduzida de bases de dados TCFE8 e MOBFE3, por ser de apenas 1%, e sutil entre as mesmas com a de base de dados SSOL4 e MOB2, por ser de 4% na última.

Além disso, a partir de 100s a ferrita começa a entrar em equilíbrio, ou seja, atingindo em média 70% da fase para qualquer tempo posterior.

Figura 38 – Comparação do crescimento da fração de ferrita entre os 3 modelos

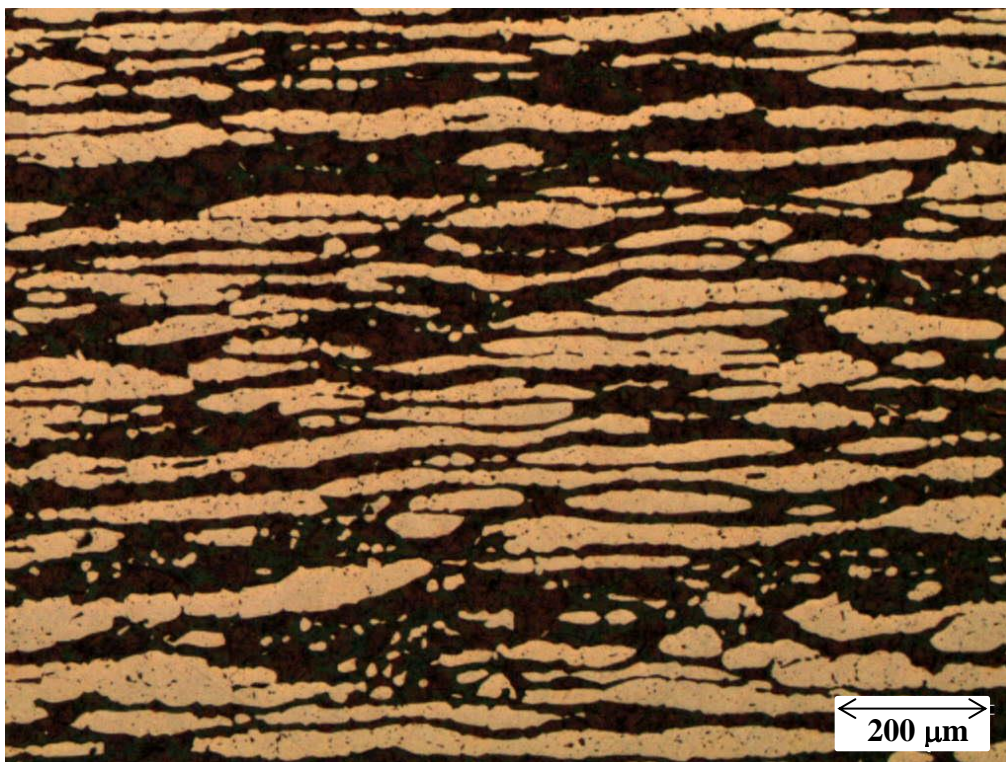


Fonte: Autora

4.3 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRATAMENTO TÉRMICO A 1250°C

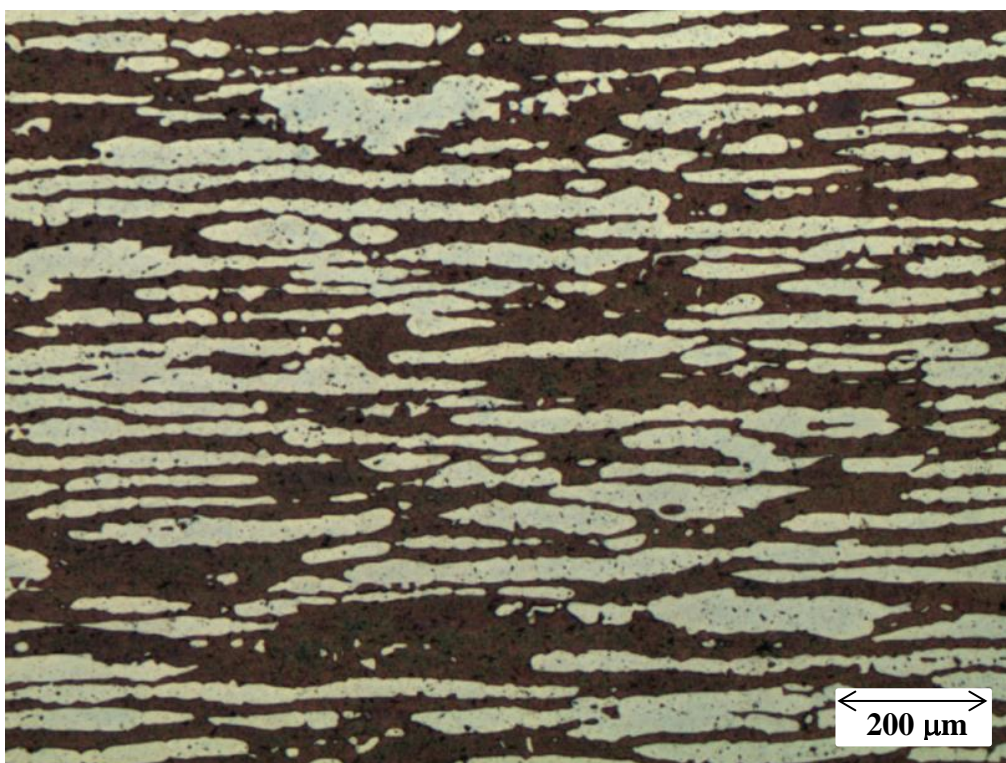
As imagens obtidas por microscopia óptica das amostras solubilizadas a 1250°C durante diferentes tempos e atacadas com o reagente Beraha modificado podem ser vistas da Figura 39 a Figura 44. Observa-se a fase ferrítica na cor escura e a fase austenítica na cor clara de morfologia padrão, por tratar-se de amostras laminadas e solubilizadas. Até 60s, nota-se grãos menores e quantidades equilibradas de ambas as fases, ao passo que entre 2 e 40 min os grãos ferríticos aumentam proporcionalmente ao tempo de tratamento térmico, obtendo-se maior fração volumétrica desta fase.

Figura 39 – Microscopia óptica da amostra 1, solubilizada a 1250°C por 36s, após ataque com Beraha modificado



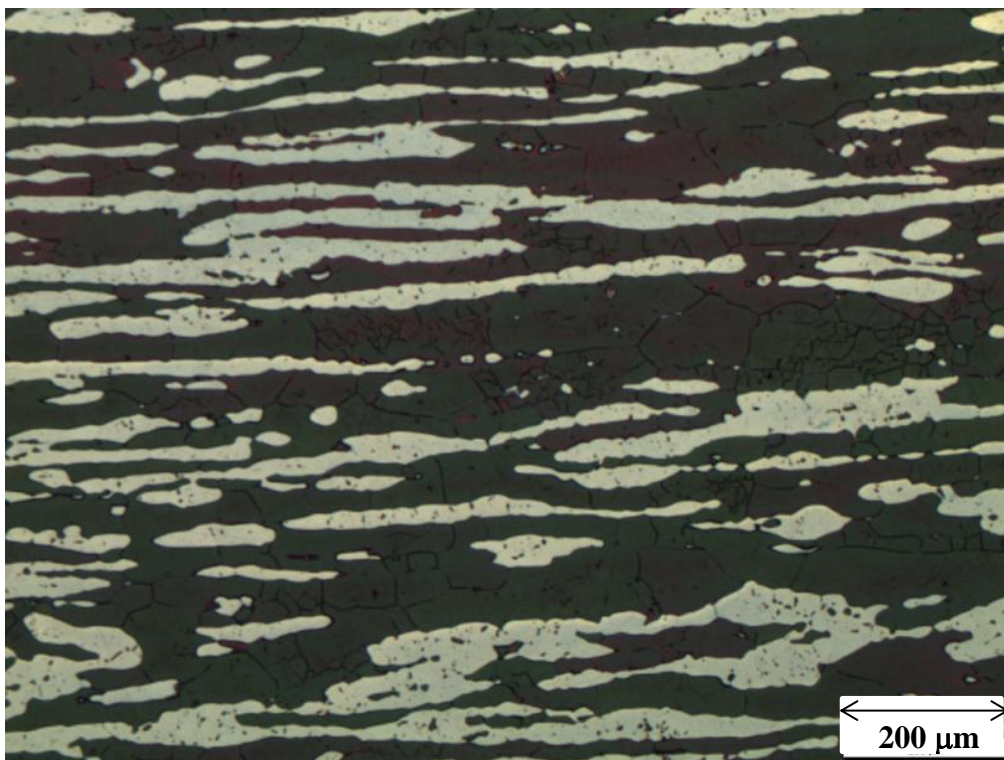
Fonte: Autora

Figura 40 – Microscopia óptica da amostra 7, solubilizada a 1250°C por 60s, após ataque com Beraha modificado



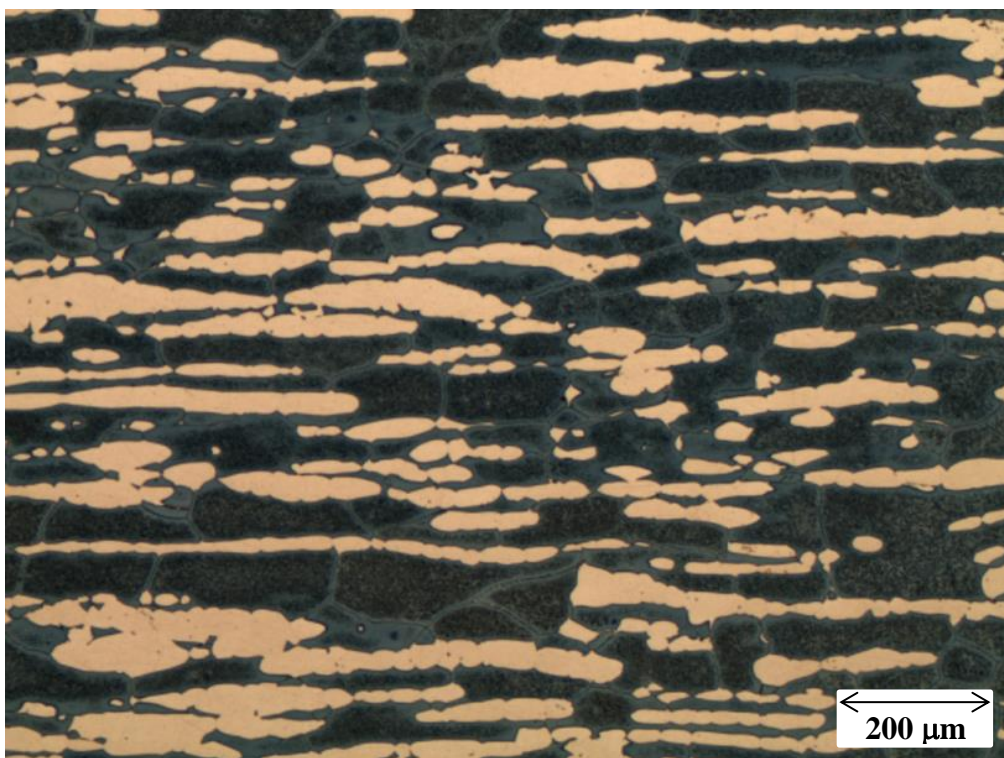
Fonte: Autora

Figura 41 – Microscopia óptica da amostra 19, solubilizada a 1250°C por 120s, após ataque com Beraha modificado



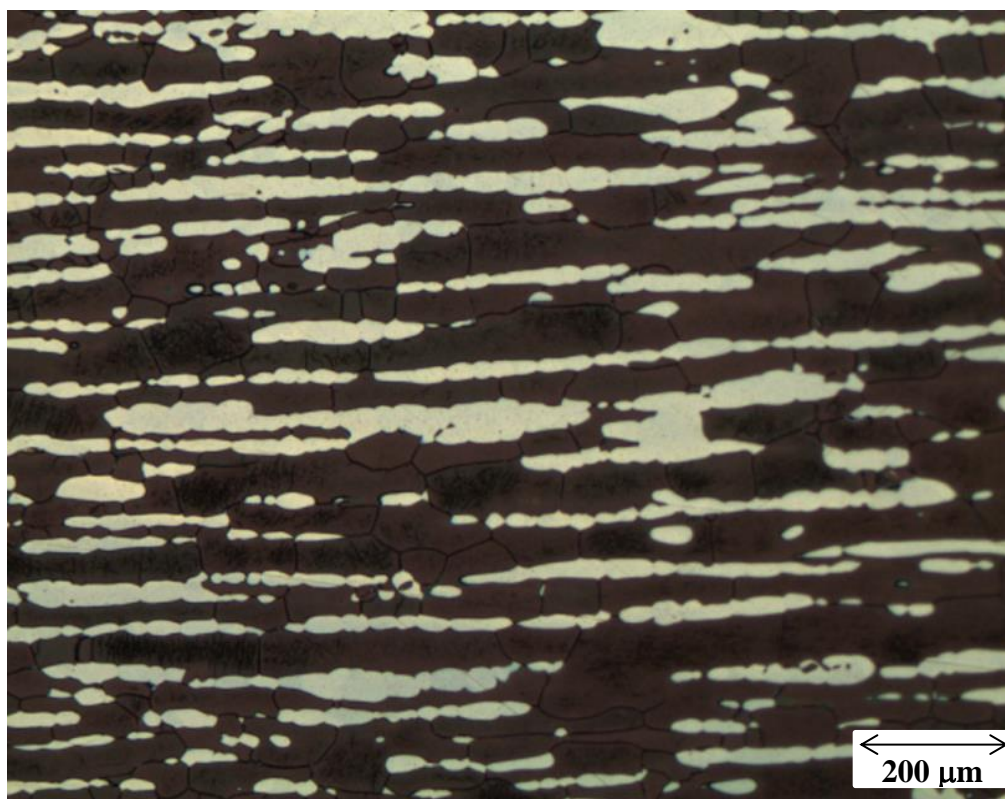
Fonte: Autora

Figura 42 – Microscopia óptica da amostra 3, solubilizada a 1250°C por 1800s, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

Figura 43 – Microscopia óptica da amostra 13, solubilizada a 1250°C por 2400s, após ataque com Beraha modificado



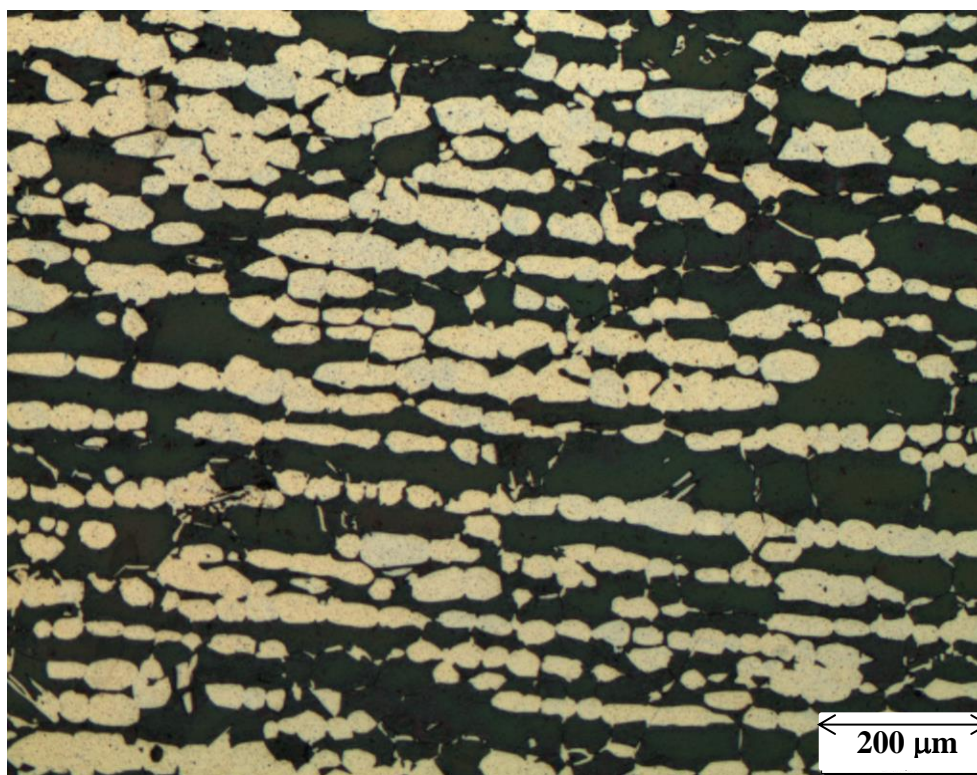
Fonte: Autora

Como descrito no item 3.3, 6 amostras foram tratadas por 3h a 1250°C para garantir que o equilíbrio atingido a 40 min tanto pelas simulações quanto pelo tratamento térmico seja de fato mantido, permanecendo na condição 70% de ferrita e 30% de austenita. Assim, pôde-se calcular o tamanho de grão desta condição, após o tratamento térmico experimental, para iniciar uma nova simulação computacional para estrutura dúplex (item 4.6) com dados reais.

Para tanto, foi obtida uma micrografia com ataque químico por Behara modificado da amostra 2, Figura 44, comprovando-se que a fração das fases esperada foi atingida, visto que obteve-se 71,3% de ferrita e 28,7% de austenita por estereologia quantitativa. Ainda, foi obtida uma micrografia com ataque eletrolítico por ácido oxálico da amostra 18, Figura 45, para o cálculo dos tamanhos de grãos.

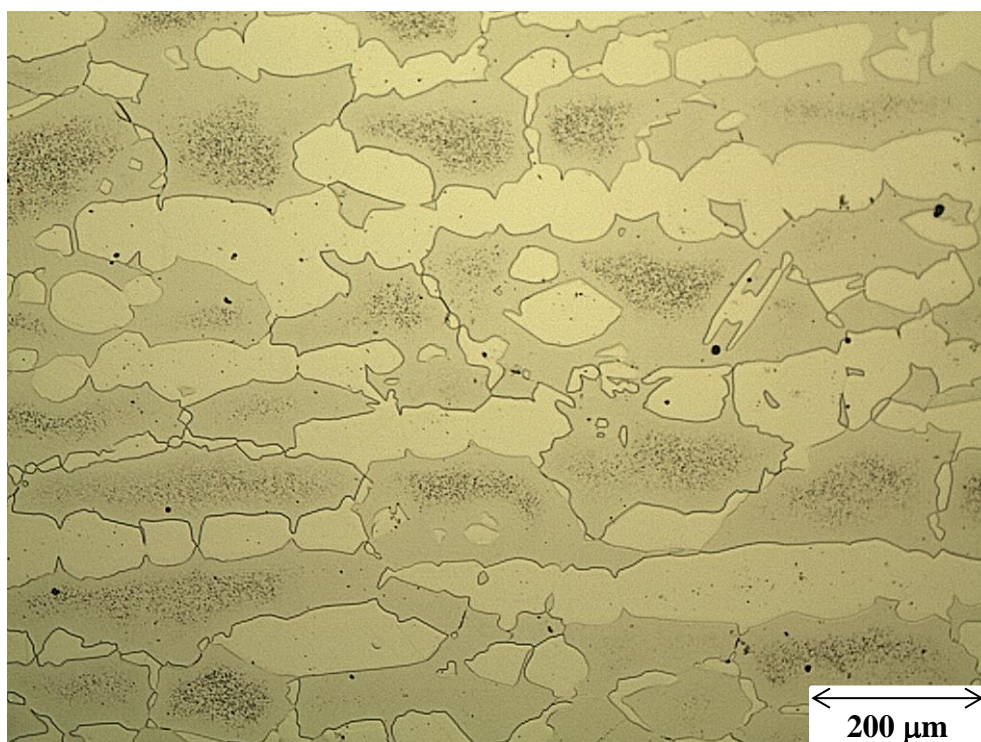
Da Figura 45, calculou-se o tamanho de grão de cada fase individual e manualmente pelo método dos interceptos lineares, de modo a obter o valor de 28 μm para a austenita e 67 μm para a ferrita.

Figura 44 – Microscopia óptica da amostra 2, solubilizada a 1250°C por 3h, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

Figura 45 – Microscopia óptica da amostra 18, solubilizada a 1250°C por 3h, após ataque com Ácido Oxálico



Fonte: Autora

A fim de confirmar as informações sugeridas através da análise das micrografias, foi obtida a fração volumétrica da ferrita após solubilização por dois métodos: estereologia quantitativa e ferritoscopia.

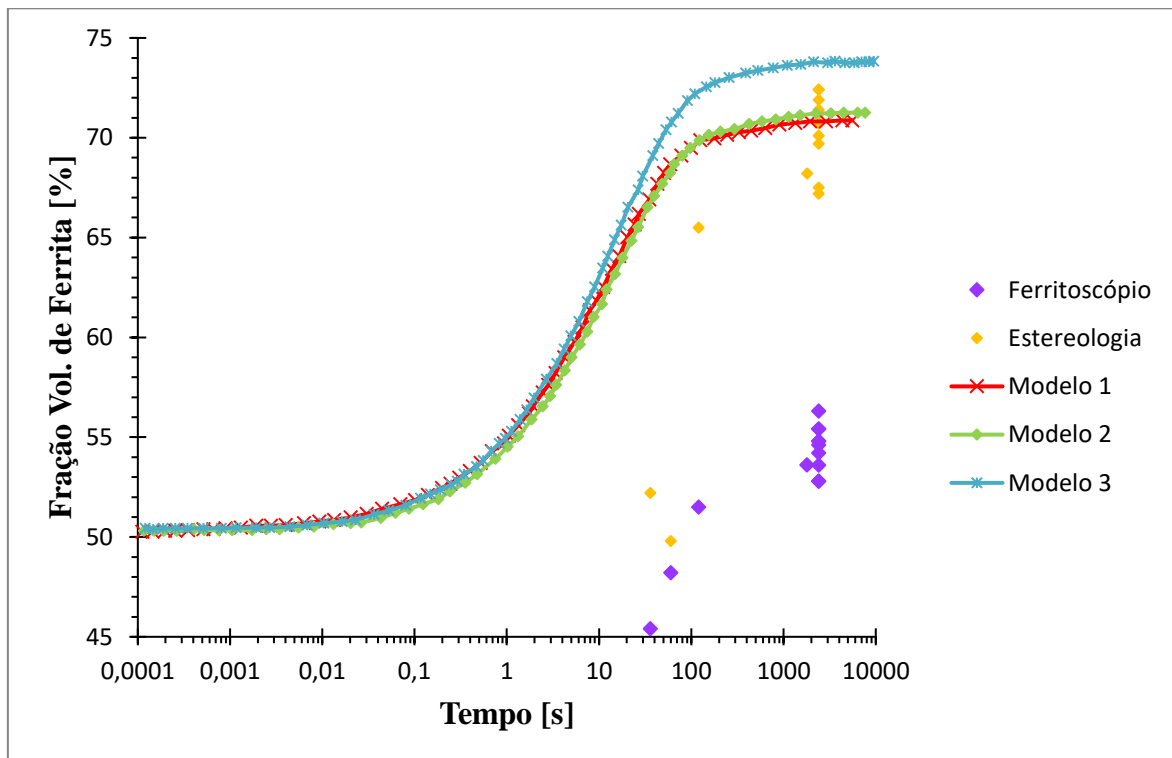
Na análise por estereologia quantitativa, é possível observar que há uma tendência de evolução da ferrita com o aumento do tempo de tratamento térmico, visto que entre 36s e 60s não há transformação de fase, enquanto que em 2 min inicia-se o aumento da fração de ferrita e, depois de 30 min a transformação de fase encerrou-se por atingir valores próximos ou superiores a 70%. Já na análise por ferritoscópio, a fração volumétrica de ferrita obtida não ultrapassou 55%, indicando equilíbrio de composição entre as fases para qualquer tempo de tratamento térmico. Isto mostra a inabilidade do ferritoscópio em descrever o aumento da fração de ferrita, esperado pelas simulações de equilíbrio e cinética, observados qualitativamente nas micrografias, e mensurado por estereologia quantitativa.

O funcionamento do ferritoscópio se baseia na quantificação da corrente induzida pelo campo magnético do componente ferromagnético (ferrita) presente na amostra, permitindo a obtenção da porcentagem da fase (SPOMBERG, 2010). A imprecisão obtida provavelmente se deve a interferência da austenita à medição do instrumento, uma vez que a estrutura texturizada por laminação dificulta a separação da fase ferromagnética (ferrita) da paramagnética (austenita).

O comparativo entre as análises pode ser visto no gráfico da Figura 46.

Nota-se que os valores obtidos por ambos os métodos de quantificação apresentam diferenças expressivas entre si e com a simulação computacional. Por conta disso, uma nova simulação foi proposta, e apresentada no próximo item, com a finalidade de aproximar-se dos resultados reais obtidos em laboratório, através de alteração da geometria do modelo para esférica, obtendo-se diferentes valores para a constante 'n' de K-J-M-A, o que faz com que a curva sigmoideal mude sua inclinação, conforme discutido em Crescimento de Segunda Fase (item 2.2). Além disso, através de diferentes tempos de tratamento térmico, é alterada a cinética de transformação de fase e, respectivamente, a constante K, fazendo com que a curva se desloque para a esquerda ou direita.

Figura 46 – Comparação entre os diferentes métodos de quantificação da fase ferrítica a 1250°C

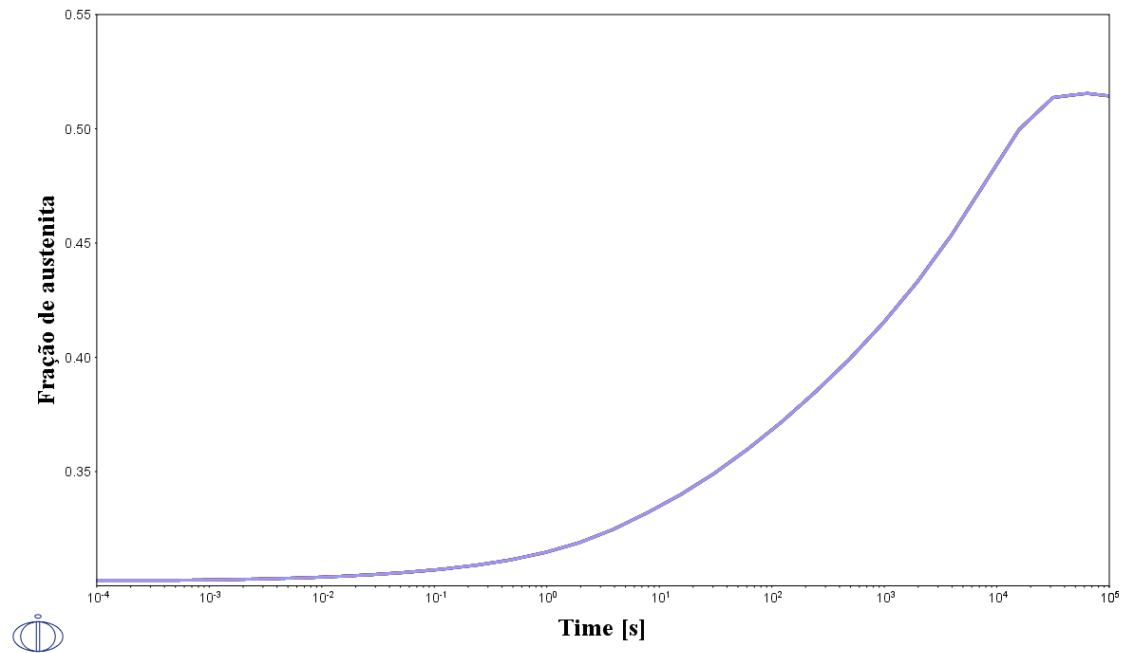


Fonte: Autora

4.4 MODELAMENTO COMPUTACIONAL DO TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA A ESTRUTURA DÚPLEX

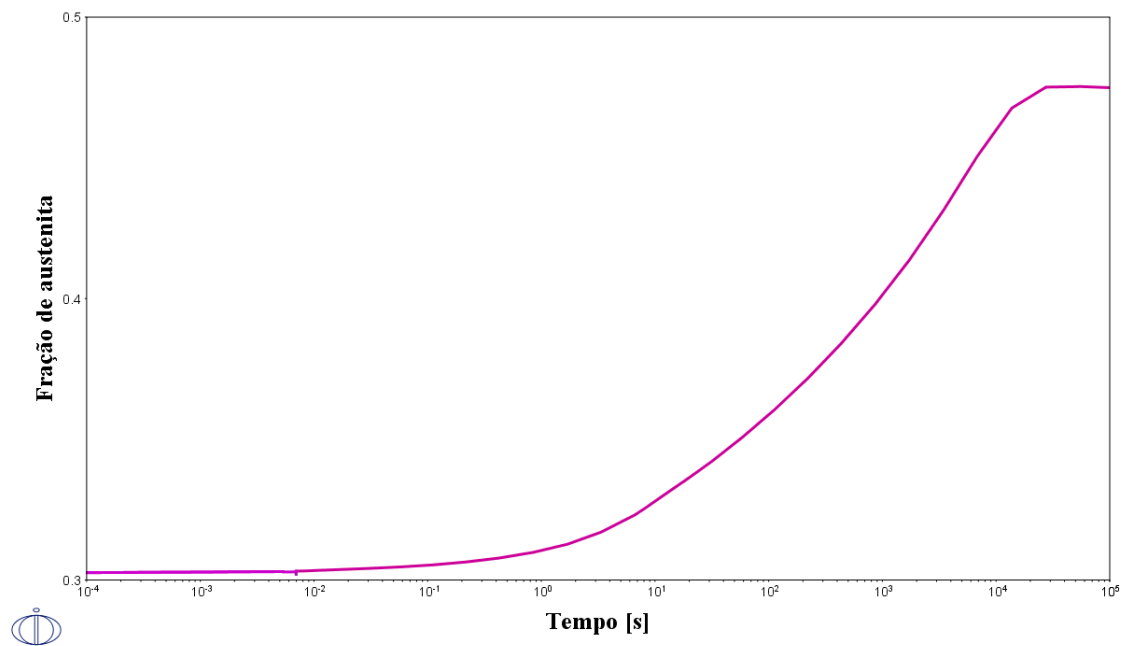
A fim de obter o equilíbrio e a cinética de transformação de fases para o tratamento térmico de solubilização para estrutura dúplex, foi simulado o aquecimento das amostras tratadas a 1250°C até as temperaturas de equilíbrio das fases discutidas previamente em Modelamento Computacional (item 4.2), Figura 47, Figura 48 e Figura 49, obtendo-se a evolução da austenita ao longo do tratamento térmico bem como a cinética de transformação de fase, utilizando-se os tamanhos de grãos de partida calculados pelo método dos interceptos lineares em Microscopia Óptica (item 3.4).

Figura 47 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 1: Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1084°C



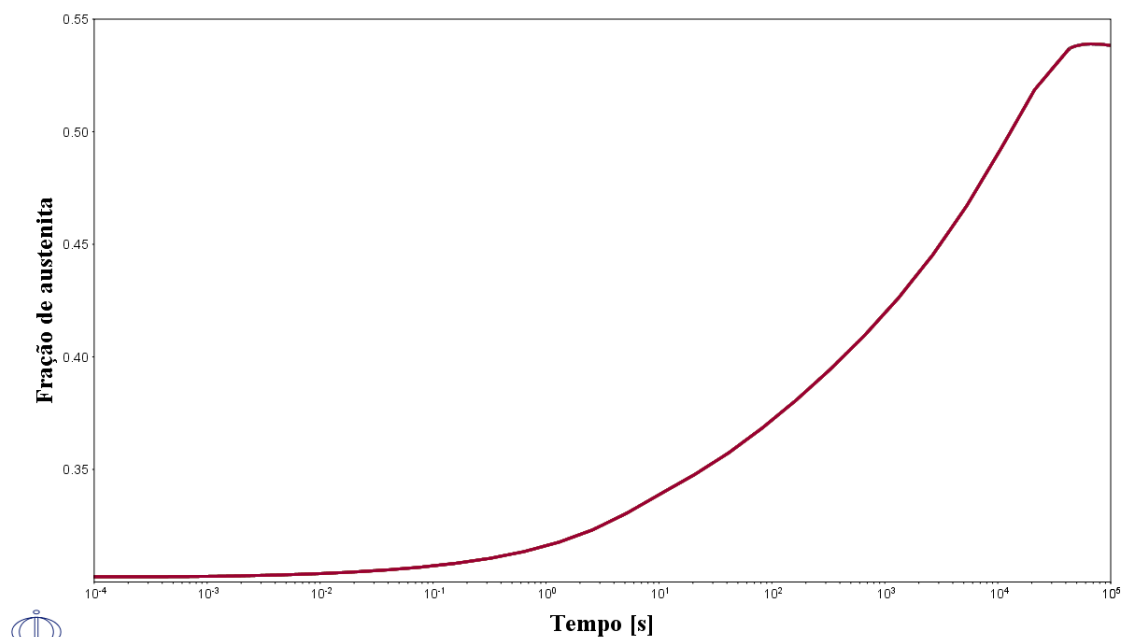
Fonte: Autora

Figura 48 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 2: Composição química completa e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1115°C



Fonte: Autora

Figura 49 – Fração de austenita em função do tempo para o modelo 3: Composição química completa e base de dados SSOL4/MOB2 a 1064°C



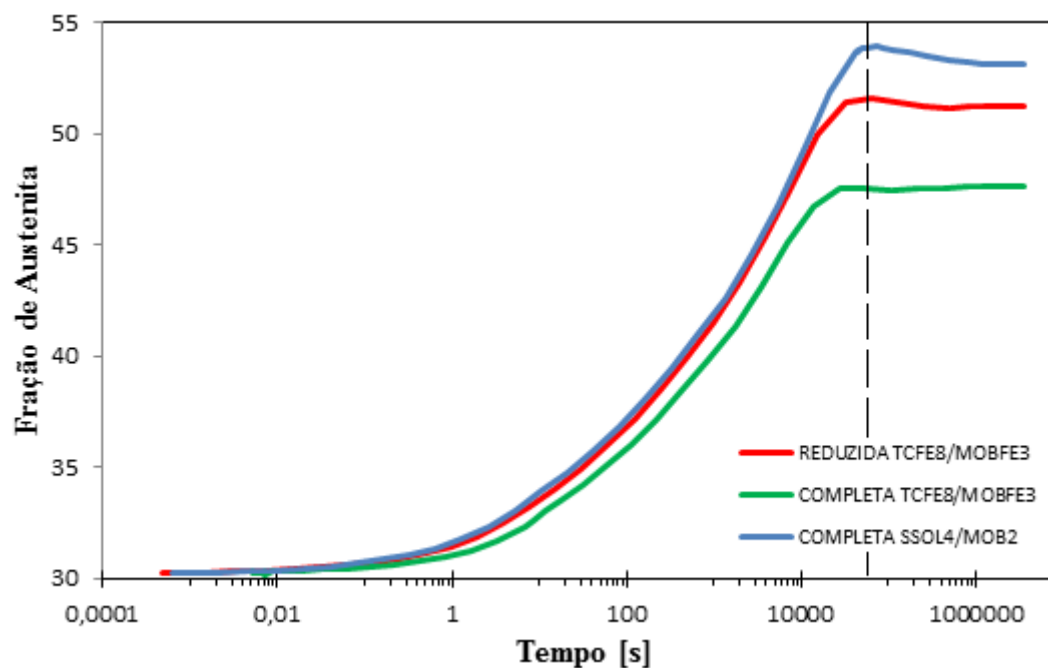
Fonte: Autora

4.4.1 Comparação da evolução de austenita em função do tempo para os modelos.

Comparando-se o crescimento sigmoide da austenita nos três modelos, Figura 50, percebe-se que entre as simulações feitas com as bases TCFE8/MOBFE3, a de composição química reduzida apresenta uma quantidade de austenita sutilmente maior em relação à completa até 10000s (2,7 h) de tratamento térmico, aumentando-se esta diferença até atingir 51,5% da fase, enquanto que a completa atinge 47,6% ao final. Já a simulação de composição química completa e bases SSOL4/MOB2, apresenta-se com maior fração de austenita durante todo o tempo em relação as demais curvas e atinge 53,9% da fase ao final do tratamento térmico.

Percebe-se também que a austenita somente entra em equilíbrio após 20000s (5,5 h) de tratamento térmico, tempo superior ao da ferrita que se estabiliza entre 100s e 1000s (16 min). Isto porque o tratamento térmico utilizado para avaliar a evolução da austenita ocorre à menor temperatura que a ferrita, tornando a difusão mais lenta. Além disso, o fato da fração volumétrica da ferrita ser maior faz com que haja menos fase austenítica para difusão.

Figura 50 – Comparação do crescimento da fração de austenita entre os 3 modelos para estrutura dúplex

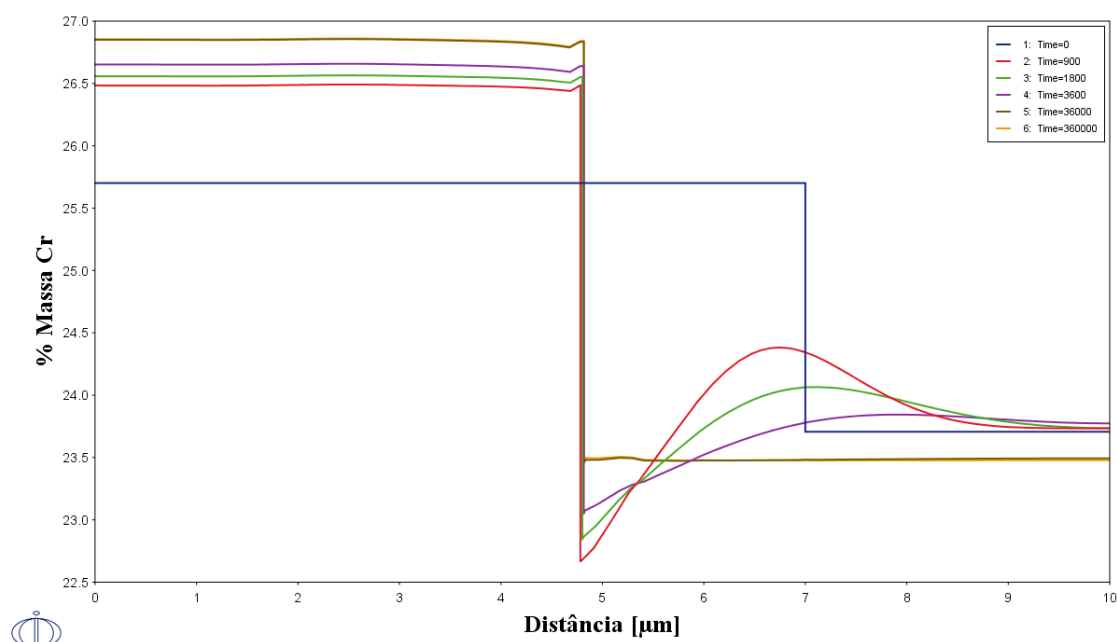


Fonte: Autora

Em seguida, foram obtidos os perfis de composição em função da distância do modelo simulado ao longo do tempo de tratamento térmico de solubilização para estrutura dúplex e, de posse dos resultados, nota-se que cada elemento progride exatamente ao contrário da primeira simulação de 1250°C, exemplificado pelo Cr em função da distância do modelo 1, Figura 51, aquecido a 1084°C.

Nota-se que a fase γ avança por difusão em direção a fase α , uma vez que a interface α/γ se desloca para esquerda e a fração inicial de Cr na ferrita reduz de 26,8% para 25,6% e aumenta de 23,5% para 23,7% na austenita após 1000h de simulação do tratamento térmico para estrutura dúplex, enquanto que para a simulação inicial a 1250°C, a fração inicial de Cr aumenta de 25,6% para 26,8% e reduz de 23,7% para 23,5%.

Figura 51 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1:
Composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBF3 a 1084°C



Fonte: Autora

O mesmo ocorre para os demais elementos e modelos, os quais se encontram no apêndice A deste trabalho.

4.5 VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DO TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA A ESTRUTURA DÚPLEX

Sabendo-se que na simulação computacional de solubilização para estrutura dúplex, realizou-se o aquecimento do material na condição atingida a 1250°C, ou seja, 70% de ferrita e 30% de austenita, até as temperaturas de condição dúplex entre as fases, 1084°C para o modelo 1, 1115°C para o modelo 2 e 1064°C para o modelo 3, obteve-se a média das temperaturas, 1088°C, para a realização da validação experimental, conforme discutido no item 3.3.

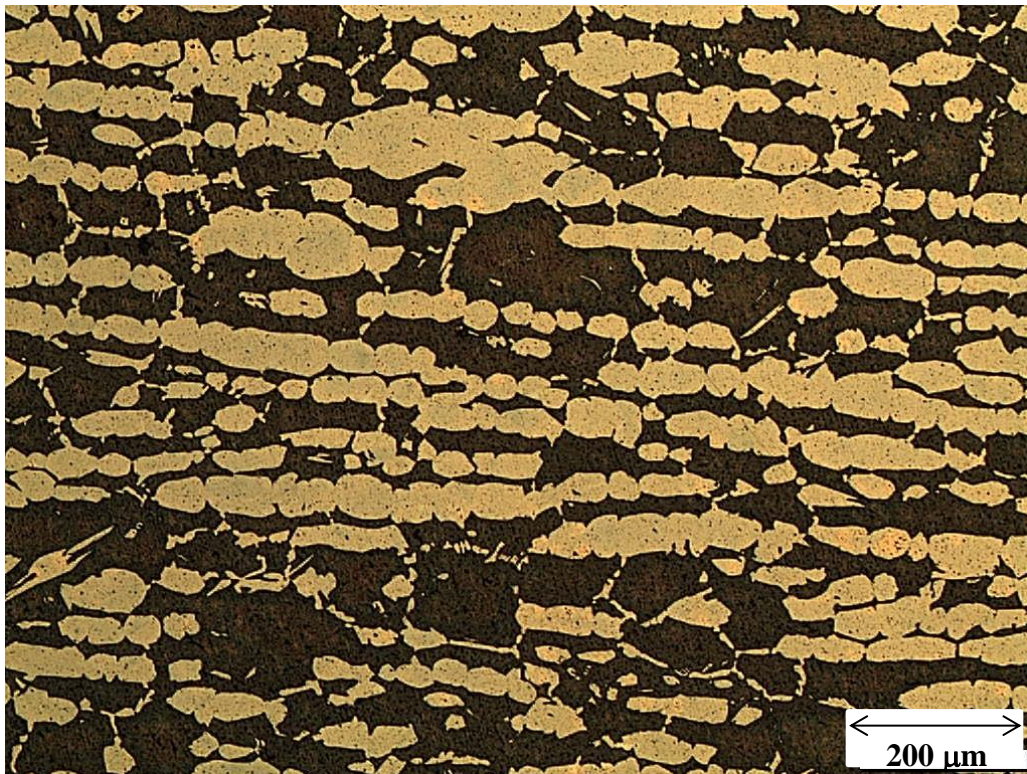
As imagens obtidas por microscopia óptica das amostras solubilizadas a 1088°C durante diferentes tempos e atacadas com o reagente Beraha modificado podem ser vistas da Figura 52 a Figura 56.

Nota-se que em relação as micrografias das amostras tratadas a 1250°C por diferentes tempos, as de solubilização para estrutura dúplex apresentam grãos maiores,

por conta de terem sido tratadas previamente a 1250°C por 3h além de diferentes tempos a 1088°C.

Até 2 min nota-se menores quantidades de austenita, ao passo que após 30 min os grãos austeníticos aumentam e permanecem praticamente do mesmo tamanho até 36 h de tratamento térmico, indicando equilíbrio no sistema nesta faixa de tempo. Além disso, a partir de 30 min e até 3h de tratamento térmico há também nucleação de austenita no interior dos grãos que ferrita, o que não é previsto na simulação, mas pode ser visto nas micrografias. Enquanto que a partir de 12h a austenita coalesce por tratar-se de tempos longos, por isso não se encontra mais nos grãos de ferrita.

Figura 52 – Microscopia óptica da amostra 4, solubilizada a 1088°C por 120s, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

Figura 53 – Microscopia óptica da amostra 5, solubilizada a 1088°C por 1800s, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

Figura 54 – Microscopia óptica da amostra 9, solubilizada a 1088°C por 3h, após ataque com Beraha modificado



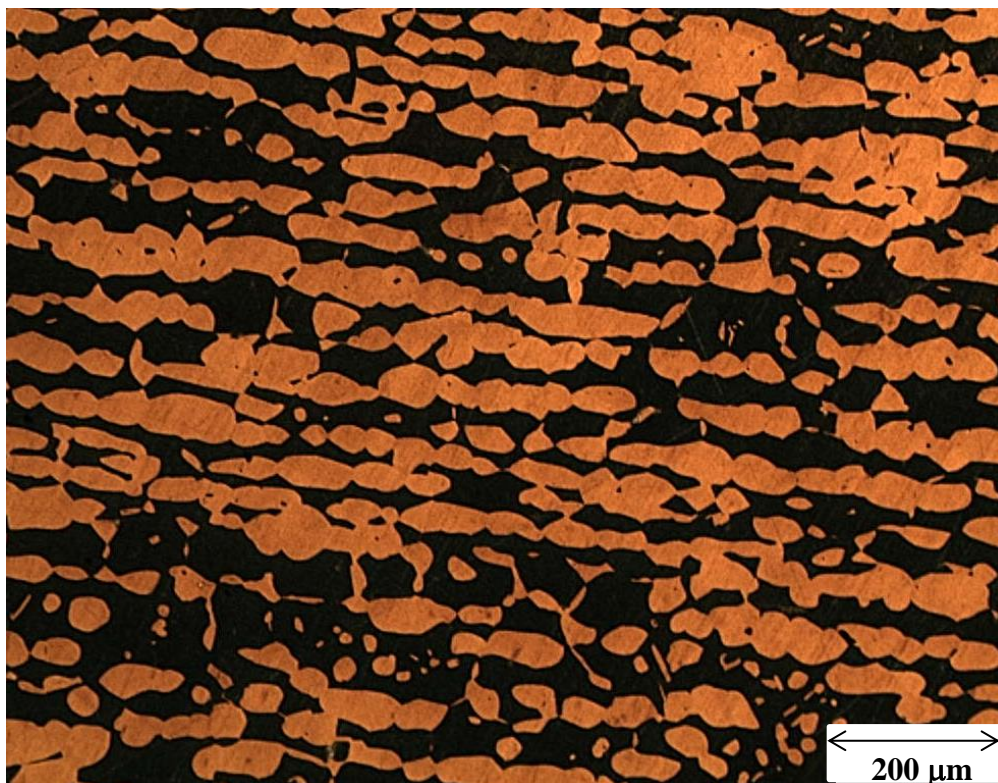
Fonte: Autora

Figura 55 – Microscopia óptica da amostra 14, solubilizada a 1088°C por 12h, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

Figura 56 – Microscopia óptica da amostra 18, solubilizada a 1088°C por 36h, após ataque com Beraha modificado



Fonte: Autora

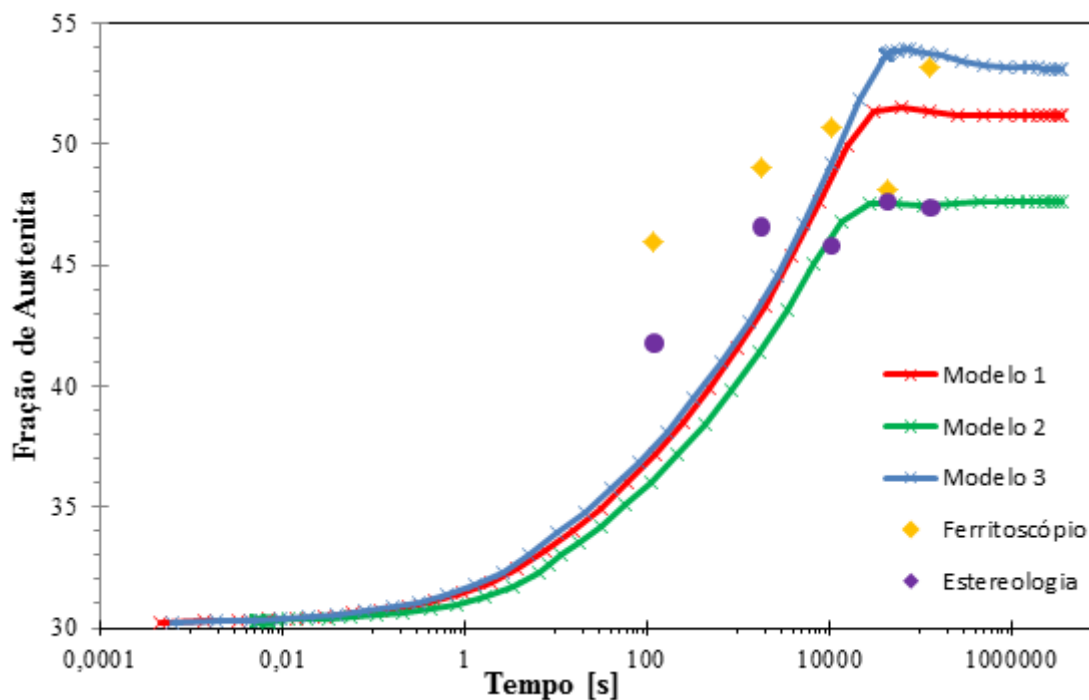
As amostras que foram solubilizadas para estrutura dúplex a 1088°C tiveram suas frações volumétricas também confirmadas por estereologia quantitativa e ferritoscopia.

Na análise por estereologia quantitativa, é possível observar que a austenita evolui de 2 min a 30 min de modo a atingir o equilíbrio, visto que em 2 min atinge-se 41% de austenita e entre 30 min e 36 h atinge-se um valor constante de 47,8%, indicando equilíbrio de composição entre as fases. O ferritoscópio por sua vez, mostra valores maiores de austenita, variando entre 46% e 53%.

Ao contrário da análise da ferrita na condição inicial de simulação, o ferritoscópio mostrou-se capaz de medir a fase ferromagnética no tratamento térmico de solubilização para estrutura dúplex por conta do longo tempo a elevada temperatura que as amostras ficaram no forno, permitindo com que os grãos crescessem e minimizassem a texturização da estrutura. Assim, através de uma conta simples, foi possível obter a fração de austenita subtraindo-se de 100% a fração de ferrita medida pelo aparelho.

Ambos os métodos de análise mostram a tendência de aumento da fase em função do tempo de tratamento térmico, conforme Figura 57.

Figura 57 – Comparação entre os diferentes métodos de quantificação da fase austenítica a 1088°C



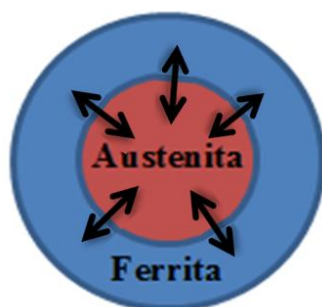
Fonte: Autora

Por meio das análises das simulações computacionais, foi possível observar que o modelo de geometria planar que simula a manutenção das fases a 1250°C não descreve os resultados experimentais obtidos, Figura 46, enquanto que o modelo planar para solubilização da estrutura dúplex a 1084°C aproxima-se dos resultados a 1088°C, principalmente quando utiliza-se a composição química completa e base de dados TCFE8/MOBF3 na simulação (modelo 2), Figura 57, descrevendo-o.

4.6 NOVAS ESTRATÉGIAS DE SIMULAÇÃO

Uma nova estratégia de simulação foi feita com a finalidade de aproximar-se ainda mais dos resultados reais obtidos em laboratório, através de alteração do modelo geométrico, obtendo-se diferente valor para a constante 'n' de K-J-M-A, conforme discutido em Crescimento de Segunda Fase (item 2.2). Além disso, através de diferentes tempos de tratamento térmico, é alterada a cinética de transformação de fase e, respectivamente, a constante K, fazendo com que a curva se desloque para a esquerda ou direita. Para tanto, optou-se por utilizar o modelo geométrico esférico para as fases, conforme esquema da Figura 58.

Figura 58 – Modelo geométrico utilizado na nova simulação computacional



Fonte: Autora

Visto que entre os três modelos simulados as diferenças são desprezíveis não somente em relação a fração volumétrica obtida, mas também da cinética de transformação de fases, realizou-se a simulação apenas do modelo 1, de geometria reduzida e bases TCFE8/MOBF3, por rodar mais rapidamente no software, economizando tempo.

Da mesma maneira que as simulações planares foram feitas, as de geometrias esféricas também, tanto simulando o aquecimento até 1250°C para avaliação da variação

da fração de ferrita, utilizando-se largura inicial de 5,0 μm para a austenita e 1,3 μm para a ferrita, quanto simulando o tratamento de solubilização para estrutura dúplex para avaliação da variação da fração de austenita a 1088°C, utilizando-se largura inicial de 14 μm para a austenita e 6,9 μm para a ferrita, ambas com tempo final entre 16h e 20h, conforme Tabela 9.

Os tamanhos de grãos são baseados nas simulações iniciais, onde a austenita que foi estimada com 10 μm de aresta no modelo planar, é posta com 5 μm de raio para análise do modelo esférico no aquecimento a 1250°C, assim como a austenita obtida com 28 μm de aresta após o tratamento a 1250°C, é simulada com 14 μm de raio para a análise do modelo esférico na solubilização a 1088°C. Considerando objetivar 50% de cada fase, utilizou-se o solver, ferramenta do Excel, obtendo-se os raios da ferrita, que subtraídos dos raios da austenita, dão o comprimento da “casca” de ferrita acima expostas para ambos os tratamentos térmicos.

Tabela 9 – Parâmetros utilizados para a simulação do modelo 1, esférico

	Forjamento	Solubilização
Bases de dados termodinâmicas	TCFE8	TCFE8
Bases de dados de mobilidade atômica	MOBFE3	MOBFE3
Tempo de simulação	16h	20h
Temperatura	1250°C	1084°C
Modelo geométrico	Esférico	Esférico
Largura da ferrita	1,3 μm	6,9 μm
Largura da austenita	5 μm	14 μm
Composição química	Reduzida	Reduzida
N° de pontos de cálculo em cada fase	50	50

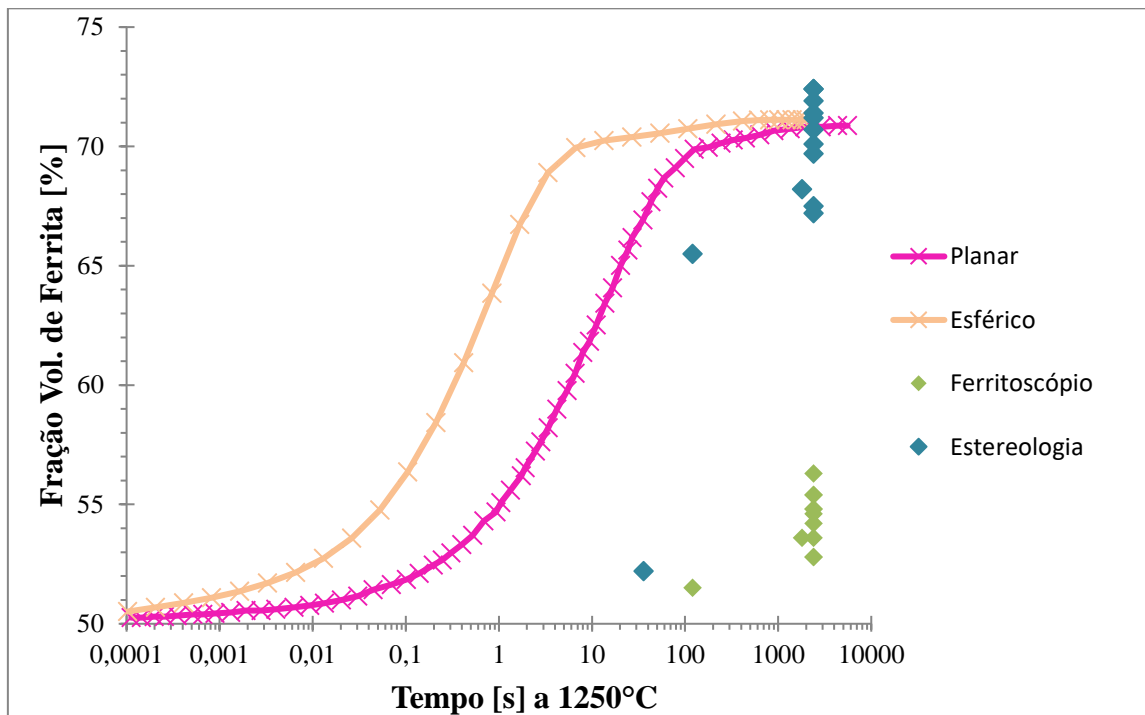
Fonte: Autora

4.6.1 Comparação da evolução das fases em função do tempo para os modelos geométricos e métodos de quantificação.

Comparando-se a nova simulação de geometria esférica com a planar previamente obtida e os resultados experimentais para o modelo 1, tem-se o gráfico da Figura 59 para o aquecimento a 1250°C e o gráfico da Figura 60 para estrutura dúplex, simulado a 1084°C e tratamento termicamente a 1088°C em laboratório. Percebe-se que a simulação de modelo geométrico esférico não descreve os resultados experimentais do aquecimento a 1250°C, porém aproxima-se do modelo planar na solubilização a 1084°C após 1800s de tratamento térmico, descrevendo-o principalmente por ferritoscopia, como discutido na Validação a 1088°C (item 4.5). Além disso, tanto a simulação de geometria planar quanto a esférica a 1084°C, atingem juntas o equilíbrio da fase, por volta de 51% de austenita.

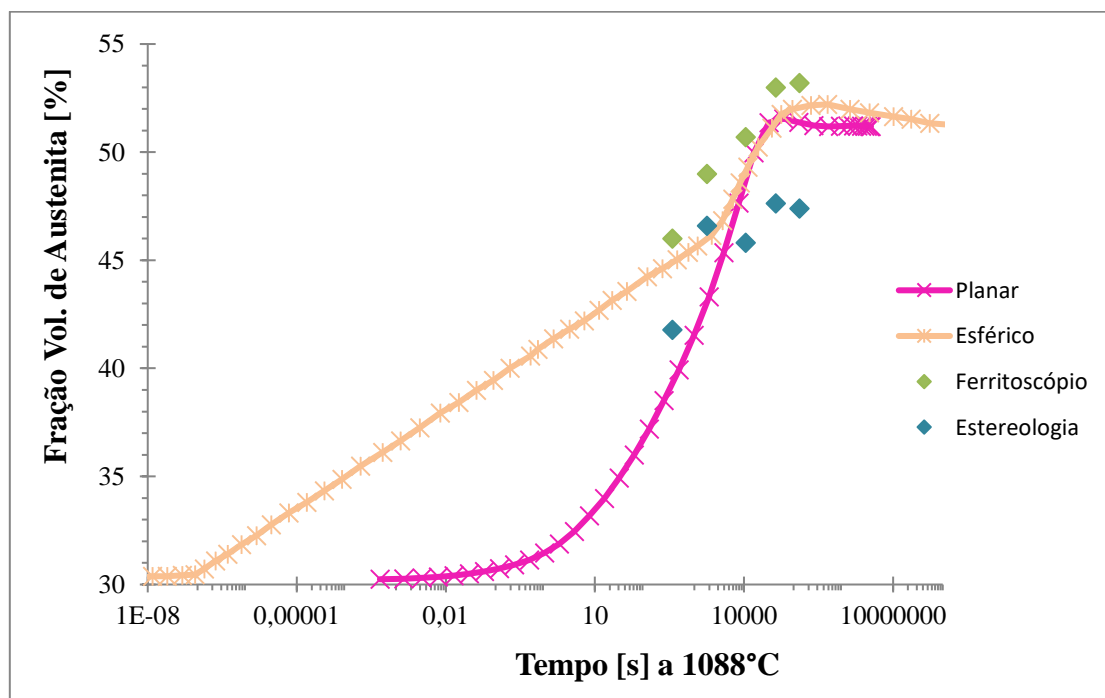
Vale expor também, que para ambas as temperaturas de tratamento térmico, o modelo geométrico esférico apresenta-se com maior taxa de transformação, o que justifica os menores tempos de simulação em relação ao planar, uma vez que os elementos químicos possuem maior interface de difusão, vide esquema da Figura 58.

Figura 59 – Comparação entre os diferentes modelos geométricos e métodos de quantificação da fase ferrítica a 1250°C, para o modelo 1



Fonte: Autora

Figura 60 – Comparação entre os diferentes modelos geométricos e métodos de quantificação da fase austenítica a 1088°C, para o modelo 1



Fonte: Autora

Quanto à cinética de transformação de fases, foram obtidas as curvas de perfis de Cr, um importante elemento químico, em função do comprimento para os modelos esféricos a 1250°C, Figura 61, e a 1084°C, Figura 62, em relação ao modelo 1 de simulação computacional.

Observa-se que os perfis de composição química do elemento para o modelo esférico são diferentes do modelo planar, visto que as curvas de tempo para o planar iniciam com alto teor de Cr na ferrita e baixo na austenita, enquanto que no modelo esférico ocorre o contrário.

Os perfis de composição dos demais elementos e modelos esféricos se encontram no apêndice B e C deste trabalho.

Figura 61 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1, esférico, composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1250°C

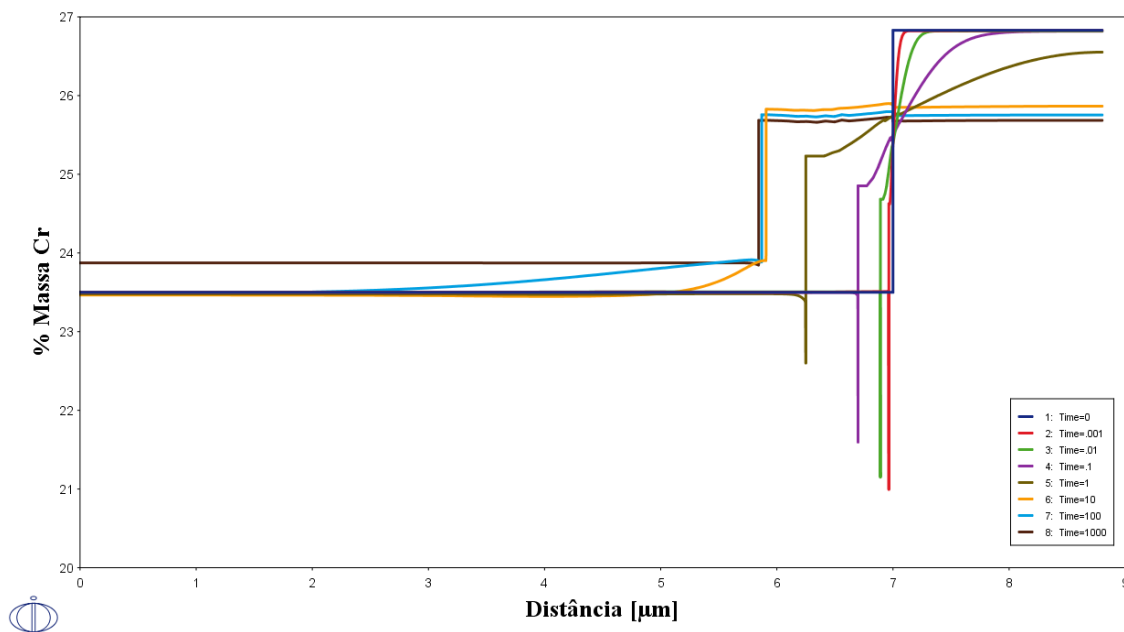
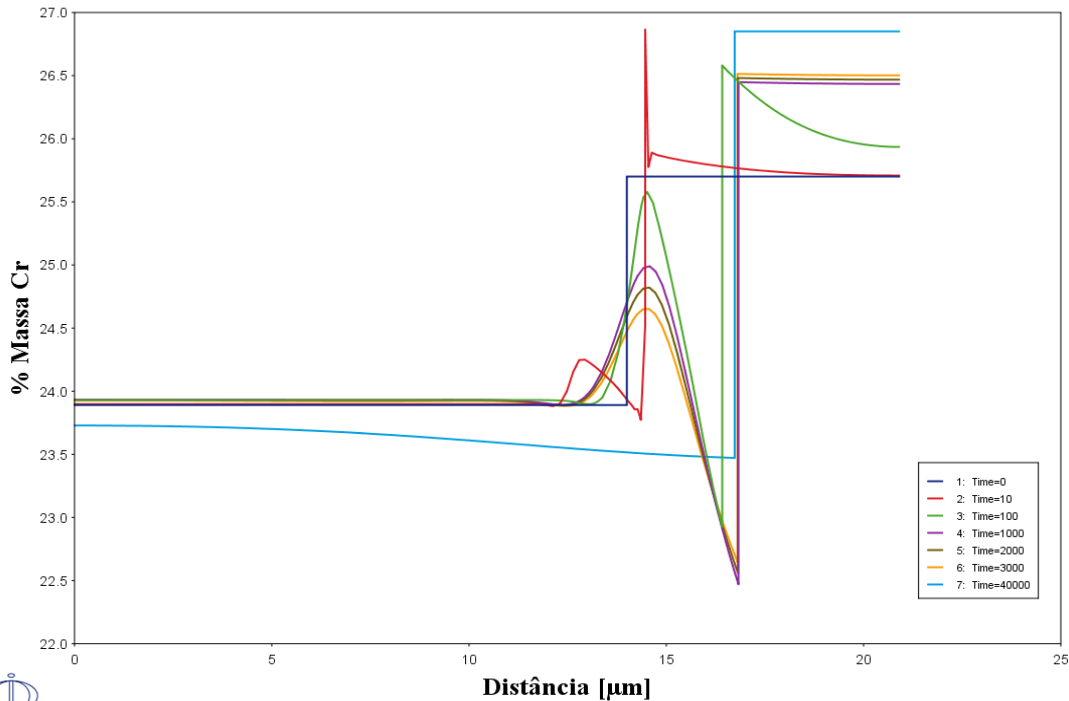


Figura 62 – Variação da % em massa do Cr em função da distância para o modelo 1, esférico, composição química reduzida e base de dados TCFE8/MOBFE3 a 1084°C



Observou-se que para todos os modelos de simulação, elementos-chave para resistência à corrosão, como o Cr e o Mo, somente entram em equilíbrio um tempo após a obtenção da fração das fases de equilíbrio. Sendo assim, se o material for tratado termicamente em apenas 30 min, tempo necessário para estabilização da ferrita e austenita, ainda haverá um gradiente de composição química e, conseqüentemente, heterogeneidade de resistência à corrosão ao longo da extensão das fases, diferente do que é desejado na prática, e este tipo de informação só pode ser obtido por meio das simulações em DICTRA.

5 CONCLUSÕES

Comparando-se os resultados dos três modelos de simulações entre si, percebe-se que as diferenças são mínimas mesmo alterando-se a composição química e as bases de dados, de modo que para simular, basta considerar os principais elementos (para o AISD em questão, Fe, Cr, Ni, Mo, N, economizando tempo de simulação).

Comparando-se os modelos geométricos entre si, nota-se que nenhum é capaz de descrever o aquecimento do material até 1250°C, enquanto que a solubilização para estrutura dúplex a 1088°C pode ser descrita tanto por meio do modelo planar quanto pelo novo modelo esférico após 60s de tratamento, visto que são utilizados tamanhos de grãos de partida, calculados após o tratamento térmico a 1250°C.

Comprova-se por estereologia quantitativa que as frações de ferrita e austenita se estabilizam após 30 min de tratamento térmico, obtendo-se 70% de ferrita a 1250°C e 47,8% de austenita a 1088°C, todavia as medidas de ferritoscópio não descrevem as simulações, visto que podem ser influenciadas pela microestrutura.

Apesar das fases estabilizarem-se após 30 min, nota-se que o equilíbrio de composição química se estabelece algum tempo após a obtenção da fração de fases de equilíbrio. Logo, é preciso deixar a composição química homogeneizar-se no patamar de máxima formação de fases da curva sigmoideal, e esta informação só pode ser obtida com os perfis de composição obtidos na simulação em DICTRA.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Simular e validar a formação de ferrita durante o resfriamento contínuo a partir de 1250°C do aço inoxidável superdúplex UNS S32750.

REFERÊNCIAS

- AVRAMI, M. **Kinetics of phase change I**. Journal of Chemical Physics, p.1103 a 1112, 1939.
- BARRIOS, H. **Ami, O Menino das Estrelas**. 7. Ed. Errepar, 1990.
- BAIN, E. C; GRIFFITHS, W. E. **An Introduction to the Iron-Chromium Nickel Alloys Trans**. AIME, n.75, p.166-213, 1927.
- BSSA – **British Stainless Steel Association**, 2017. Disponível em: <<https://www.bssa.org.uk/>>. Acesso em: 08 setembro 2017.
- BORGENSTAM et al. **DICTRA, a tool for simulation of diffusional transformations in alloys**, 2000. Journal of Phase Equilibria, v. 21, n°3, p. 269 – 280.
- CHRISTIAN, J.W. **The theory of transformations in metals and alloys**, 2002. Oxford: Pergamon, p.529-55.
- DAVIS, J. R. **Metals Handbook Desk Edition**, 1998. 2nd. ed. ASM International Handbook Committee. p. 868.
- DIETER G. E. **Mechanical Metallurgy**, 1988. 3. ed. UK: McGraw-Hill Book Company.
- ELMER, J. W.; PALMER, T. A.; SPECHT, E. D. **Direct observation of sigma phase formation in duplex stainless steel using in-situ synchrotron X-Ray diffraction**, 2007. Metallurgical and materials transactions.p. 464-475.
- FORGAS, A. **Influência da temperatura de recozimento intrecrítico no comportamento mecânico de aço bifásico**, 2009. Dissertação, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2009. Disponível em: <http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/AFJr_2009.pdf>. Acesso em: 05 agosto 2017.
- FORGAS, A. **Transformação de ferrita em austenita induzida por deformação plástica no aço inoxidável duplex UNS 31803**, 2016. Tese, Instituto de Tecnologia de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos, 2016. Disponível em: < <http://fei.edu.br/~rodrmagm/trabalhos.html>>. Acesso em: 06 agosto 2017.
- FLOREEN, S.; HAYDEN, H. W. **The Influence of Austenite and Ferrite on the Mechanical Properties of Two-Phase Stainless Steels**, 1968. p. 85-93 53.
- GARFIAS-MESIAS, L. F. SYKES, J. M. TUCK, C. D. S. **The effect of phase compositions on the pitting corrosion of 25 Cr duplex stainless steel in chloride solutions**, 1996. Corrosion science n. 8 v. 38 p. 1319-30.

LEANDRO, R. M. **Cinética de crescimento de grão na solubilização de um aço inoxidável dúplex**, 2016. Dissertação, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2016. Disponível em: <http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/2016/VF_Rafael_Malagutti_Leandro.pdf>. 02 setembro 2017

MAGNABOSCO, R. **Modelling of sigma phase formation during isothermal aging of superduplex stainless steel**, 2015. In: European Stainless Steel Conference – Science & Market, Praga. Disponível em: <<http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/teseRM.pdf>>. Acesso em: 08 outubro 2017.

MARANGONI, J. **Estudo da transformação de fase induzida por deformação em aço inoxidável superdúplex**, 2012. Dissertação, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2012. Disponível em: <http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/2015/Disserta%C3%A7%C3%A3o%20Defesa%20-%20JM_FINAL.pdf> . Acesso em: 03 novembro 2017.

MORAIS, L. C. **Simulação da cinética de formação da fase sigma durante o envelhecimento isotérmico de aço inoxidável dúplex**, 2017. Dissertação, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2017. Disponível em: <http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/2017/DISSERTA%C3%87%C3%83O_LCM.pdf> Acesso em: 05 agosto 2017.

MORAIS, L. C, MAGNABOSCO, R. **Investigações experimentais e simulação DICTRA ® da formação da fase sigma em um aço inoxidável duplex**, 2017. Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2017.

NILSSON, J.O. **Super Dúplex Stainless Steel**. Materials Science and Technology, 1992. p. 685-700.

PORTER, D.A; EASTERLING, K.E. **Phase transformations in metals and alloys**, 1992. 2 Ed. New York: Taylor & Francis, p. 514.

PORTGIETER, H. J.; CORTIE, M. B. **Determination of the Microstructure and Alloy Element Distribution in Experimental Duplex Stainless Steels**, 1991, South Africa. P. 155-165.

RAYNOR, G. V.; RIVLIN, V. G. **Phase equilibria in iron ternary alloys**, 1985. London, p. 316-332.

SANTOS, D. C. **Estudo das transformações de fase isotérmica do aço UNS S31803 envelhecido entre 700 e 950 °C**, 2013. Tese. Instituto de Tecnologia de Aeronáutica (ITA), São José dos Campos, 2013. Disponível em: <http://fei.edu.br/~rodrmagm/doutorado/2013/DCS_Tese_Final.pdf>. Acesso em: 08 outubro 2017

SANTOS, D. C.; MAGNABOSCO, R. **Kinect study to predict sigma phase formation in duplex stainless steel**, 2016. Metallurgical and Materials Transactions A. Disponível em: <<http://fei.edu.br/~rodrmagm/public.html>>. Acesso em: 11 novembro 2017

SOLOMON, H. D.; DEVINE, T. M. Jr. **Dúplex Stainless Steel: A tale of two phases.** In: DÚPLEX STAINLESS STEELS, 1982, Ohio, Conference Proceedings. ASM Metals Park. p. 693-756.

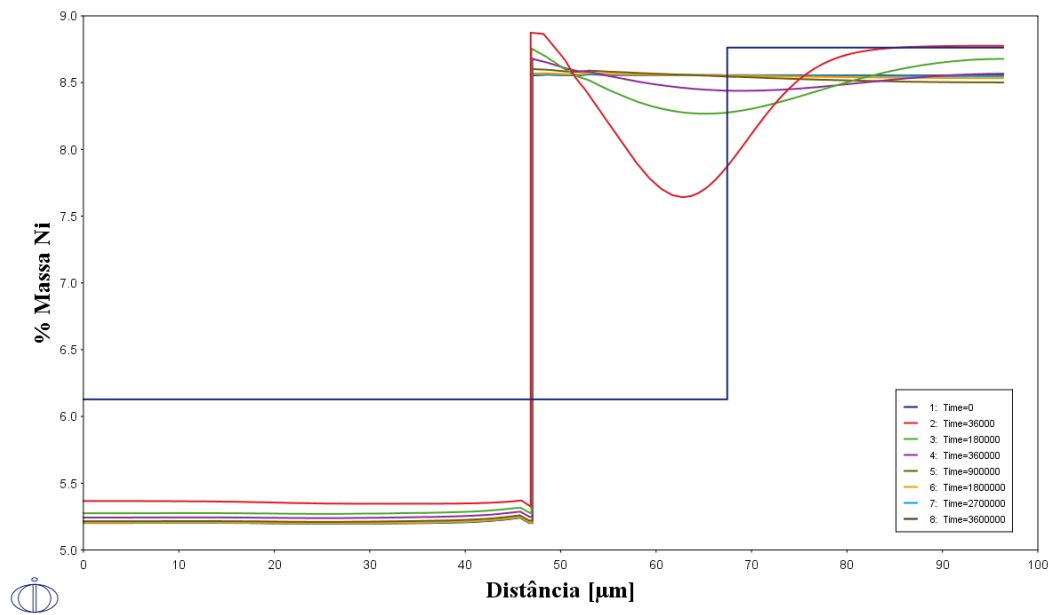
SPOMBERG, S. **Uso de difratometria de raios-x na quantificação de ferrita e austenita em aços inoxidáveis dúplex**, 2010. TCC, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2010. Disponível em:
< http://fei.edu.br/~rodrmag/PROJETOS_IC/2011/final_SS_2011.pdf>. Acesso em: 13 novembro 2017

Thermo-Calc Software, 2017. Disponível em: <<http://www.thermocalc.com>>. Acesso em: 10 setembro 2017.

APÊNDICE A – MODELO GEOMÉTRICO PLANAR, TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA ESTRUTURA DÚPLEX.

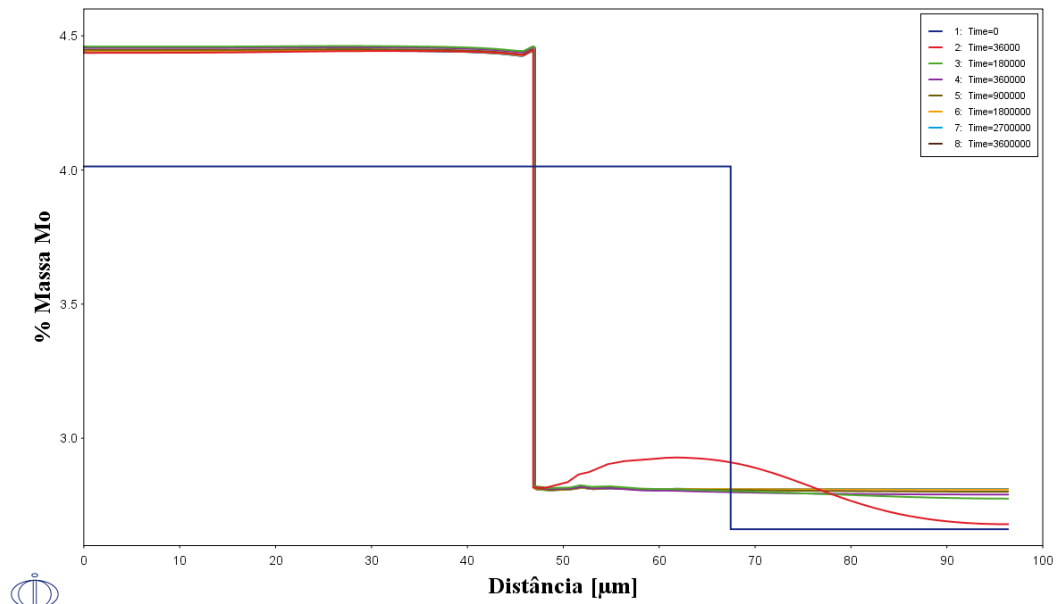
Modelo 1: Análise da composição química reduzida utilizando-se bases de dados TCFE8/MOBF3 a 1064°C.

Figura 63 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.



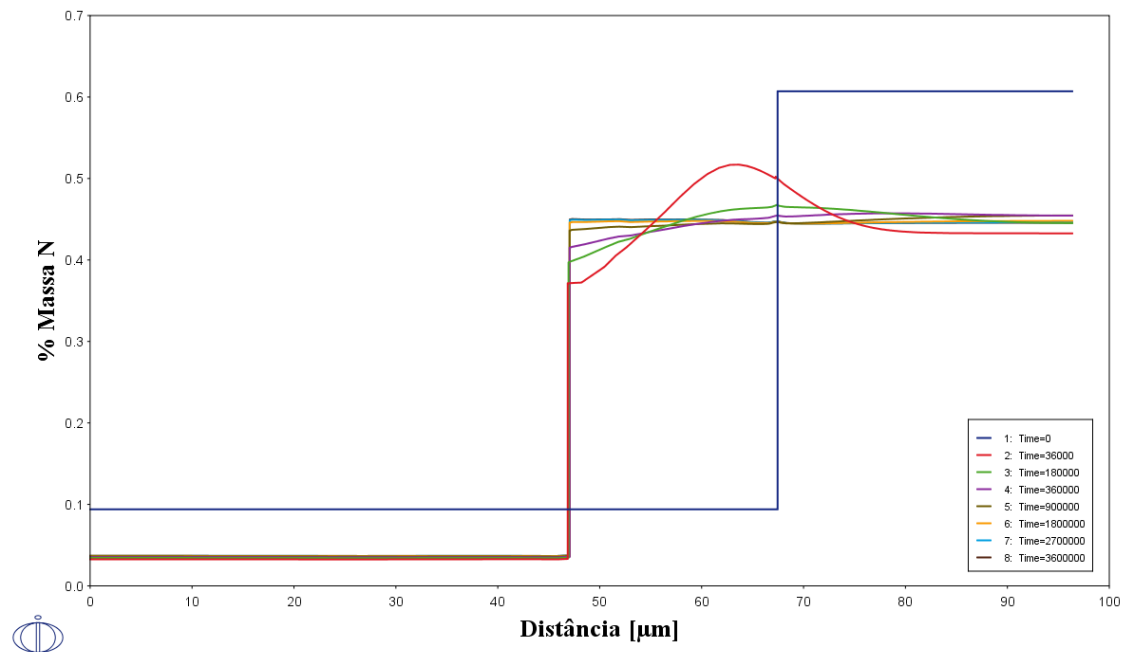
Fonte: Autora.

Figura 64 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.



Fonte: Autora.

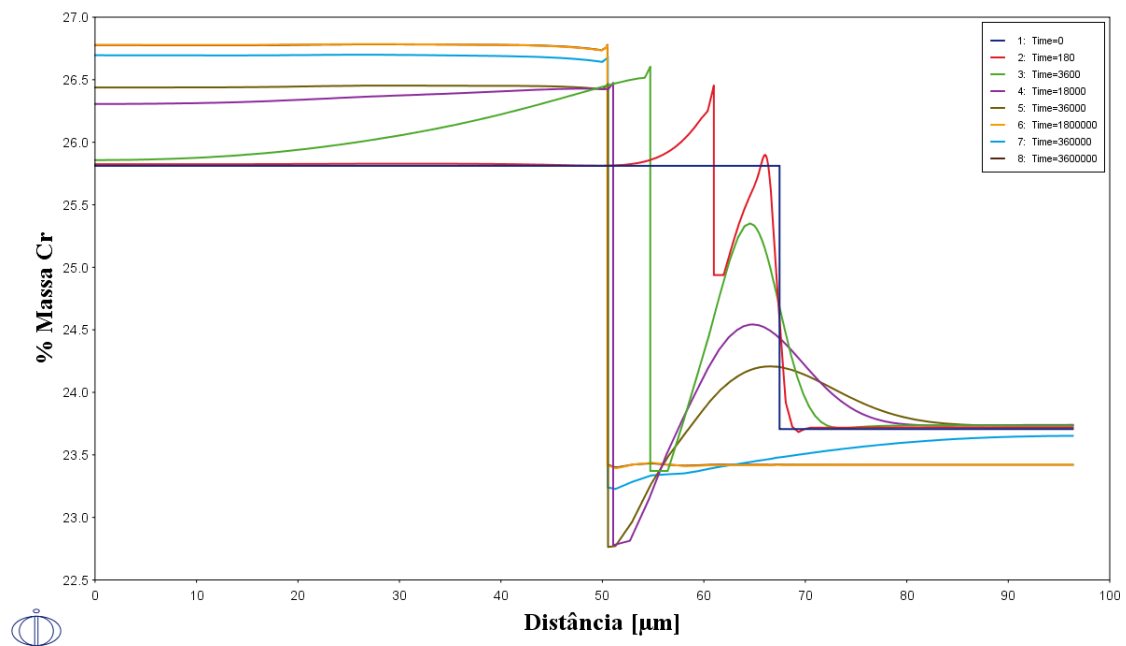
Figura 65 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria planar a 1084°C.



Fonte: Autora.

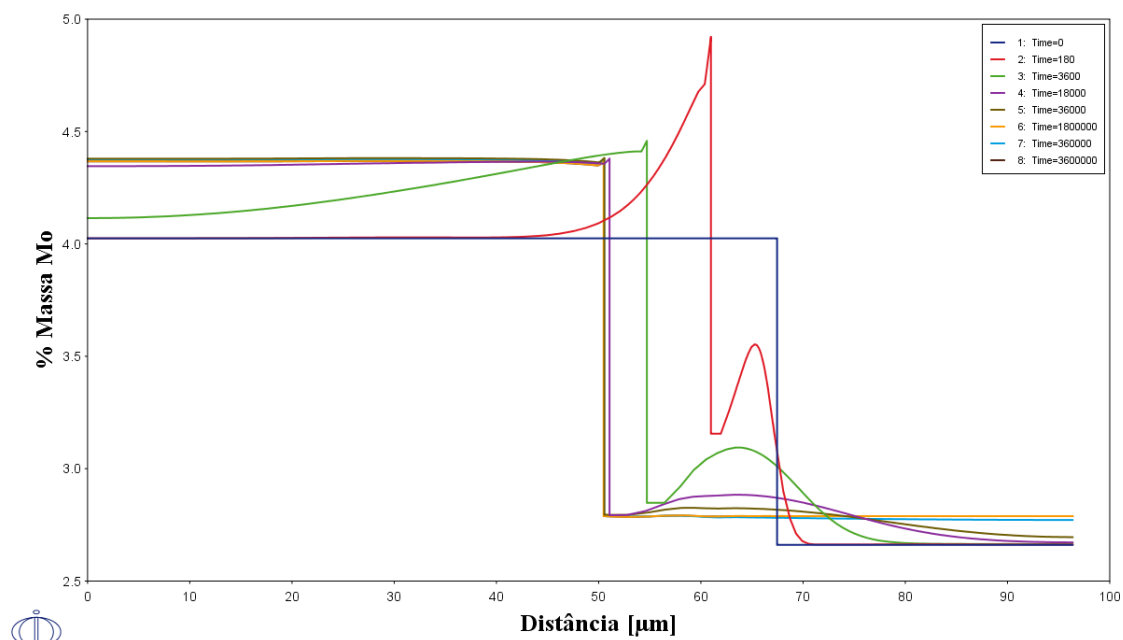
Modelo 2: Análise da composição química completa utilizando-se bases de dados TCFE8/MOBFE3.

Figura 66 – Variação da % em massa de Cr em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



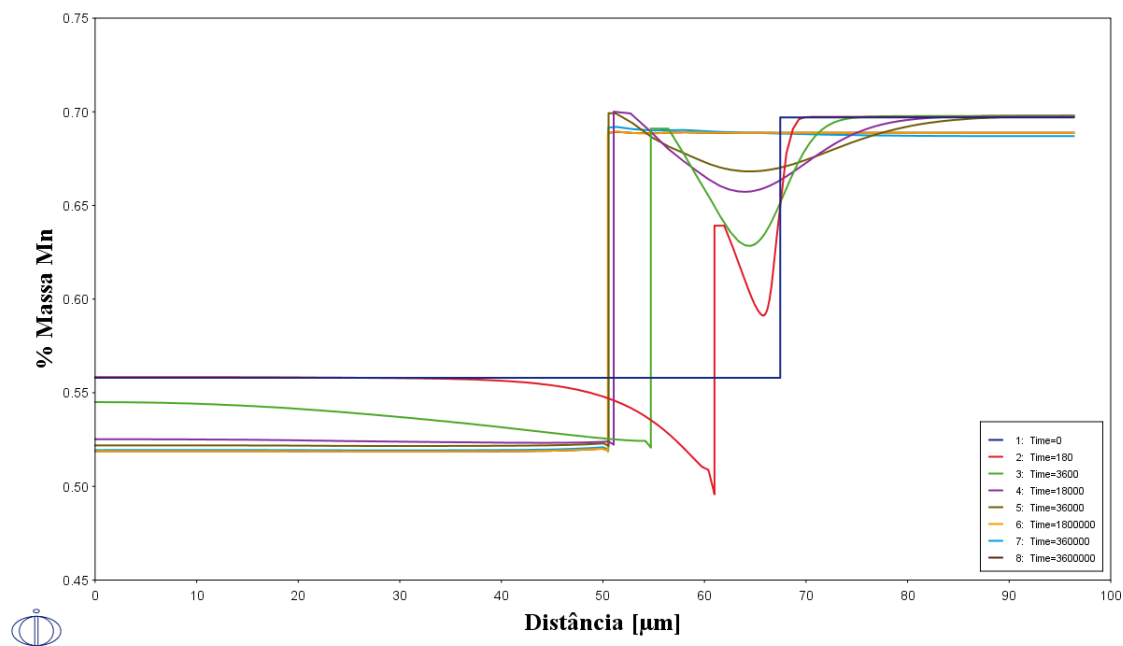
Fonte: Autora.

Figura 67 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



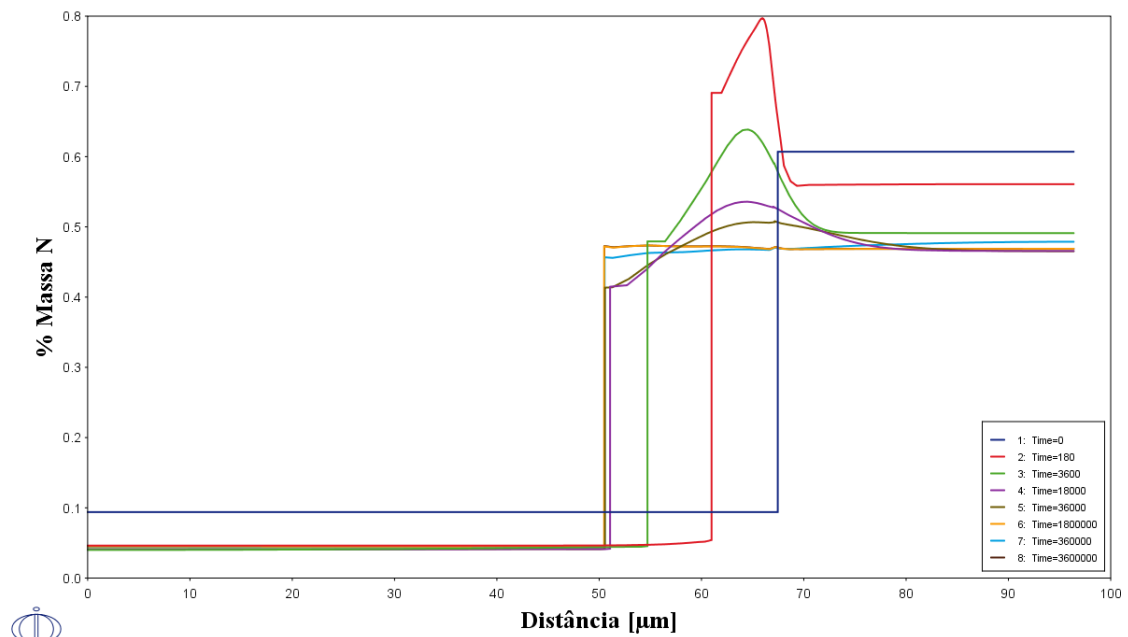
Fonte: Autora.

Figura 68 – Variação da % em massa de Mn em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



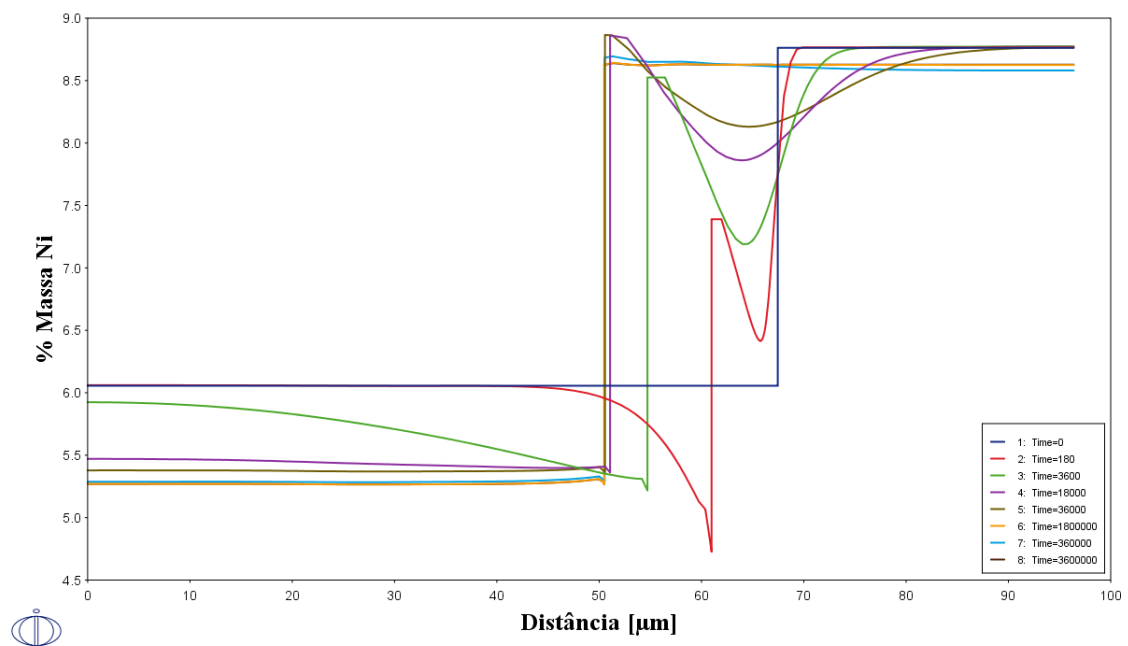
Fonte: Autora.

Figura 69 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



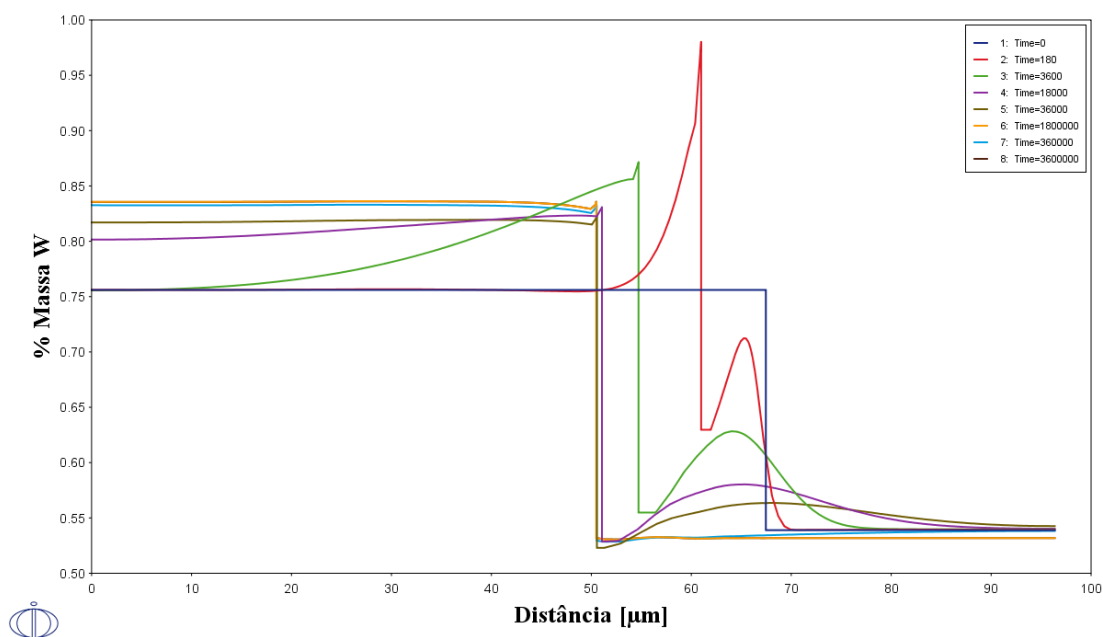
Fonte: Autora.

Figura 70 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



Fonte: Autora.

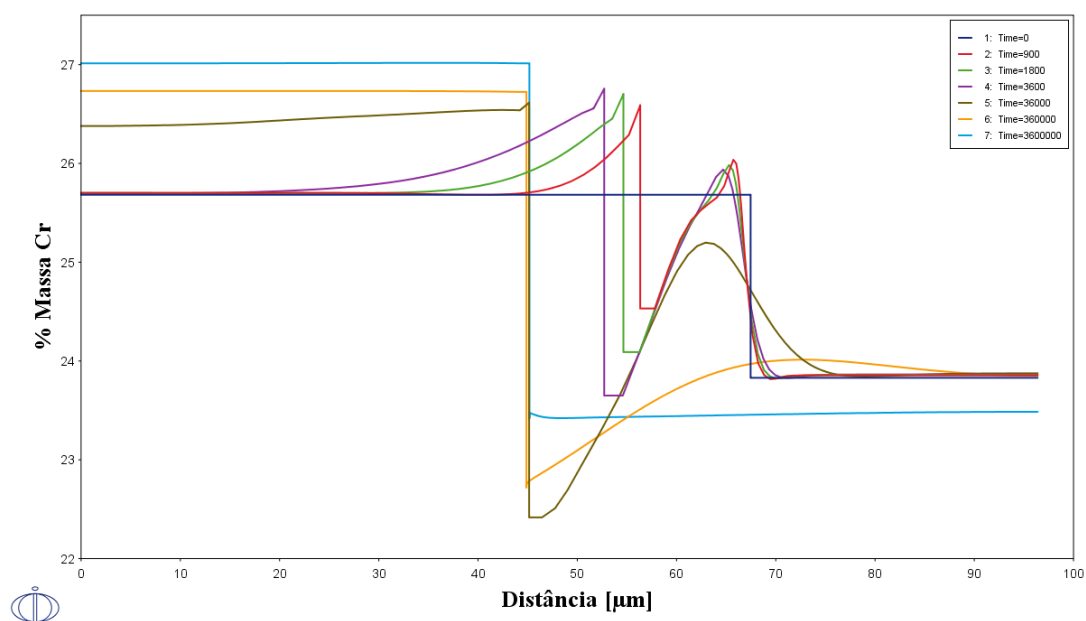
Figura 71 – Variação da % em massa de W em função da distância, modelo 2, geometria planar a 1115°C.



Fonte: Autora.

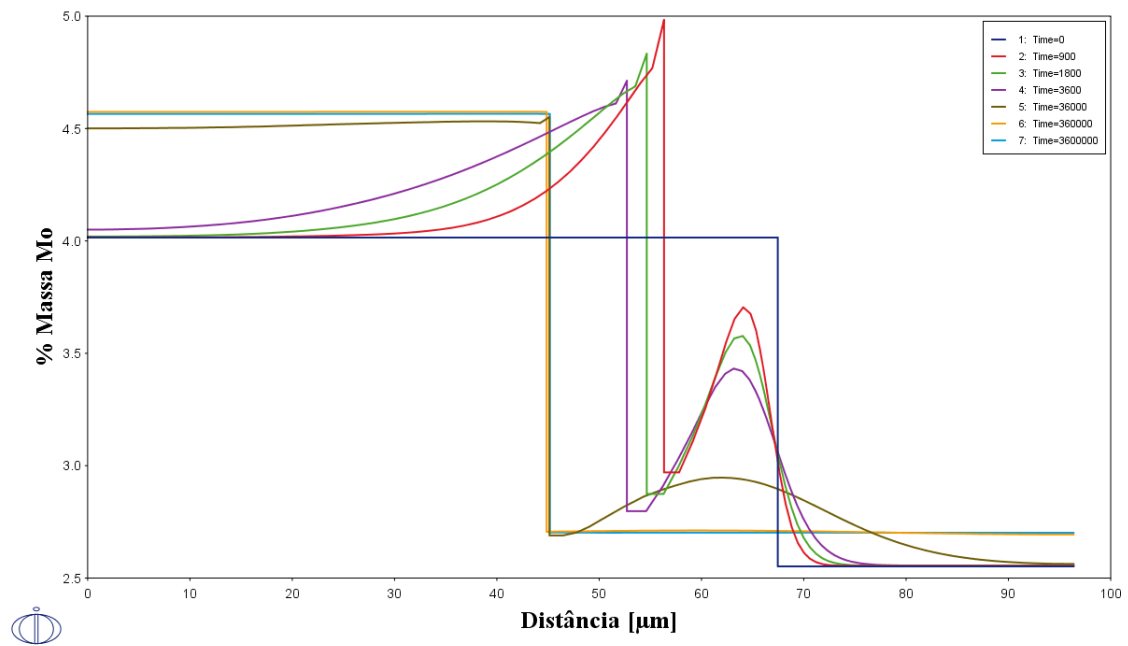
Modelo 3: Análise da composição química completa utilizando-se bases de dados SSOL4/MOB2 a 1064°C.

Figura 72 – Variação da % em massa de Cr em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.



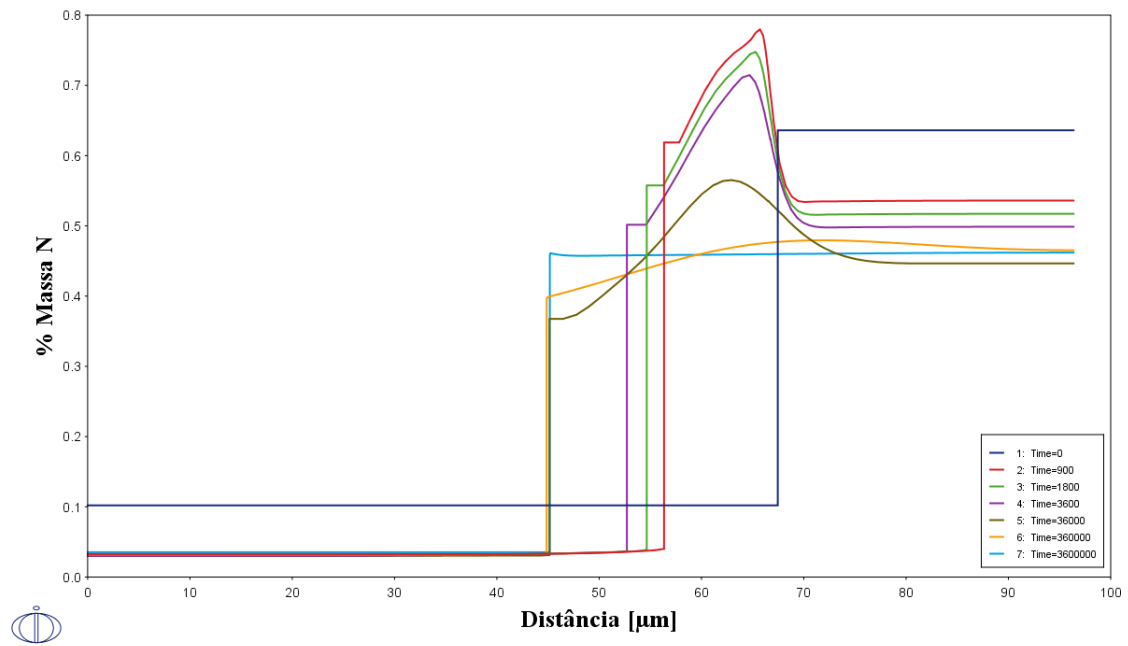
Fonte: Autora.

Figura 73 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.



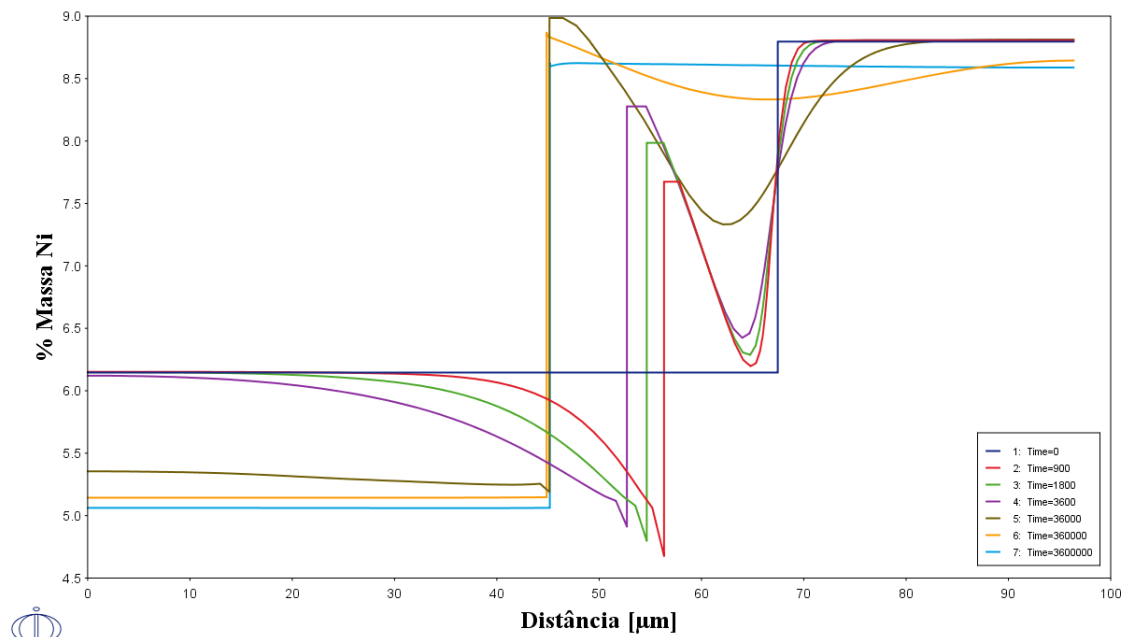
Fonte: Autora.

Figura 74 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.



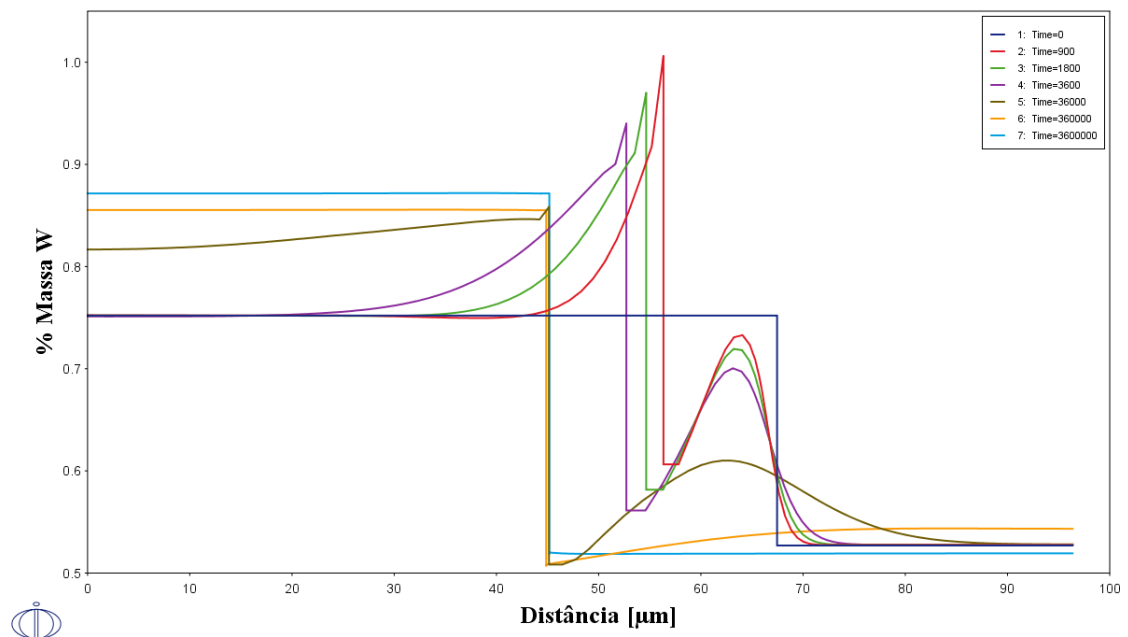
Fonte: Autora.

Figura 75 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.



Fonte: Autora.

Figura 76 – Variação da % em massa de W em função da distância, modelo 3, geometria planar a 1064°C.

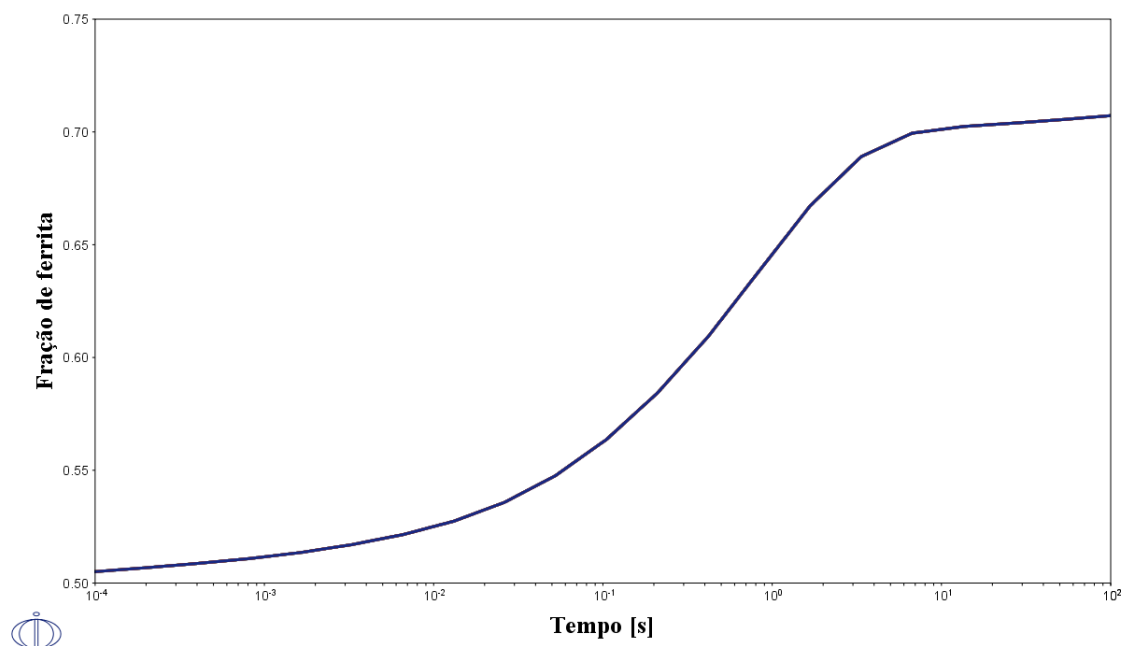


Fonte: Autora.

APÊNDICE B – MODELO GEOMÉTRICO ESFÉRICO, TRATAMENTO TÉRMICO A 1250°C.

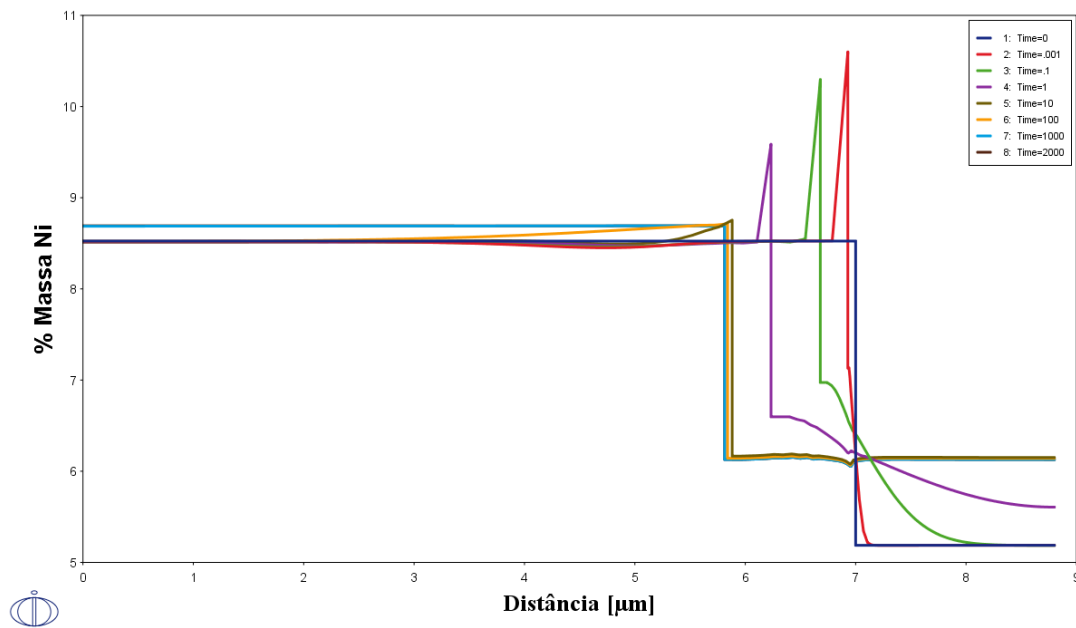
Modelo 1: Análise da composição química reduzida utilizando-se bases de dados TCFE8/MOBFE3.

Figura 77 – Fração de ferrita em função do tempo, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.



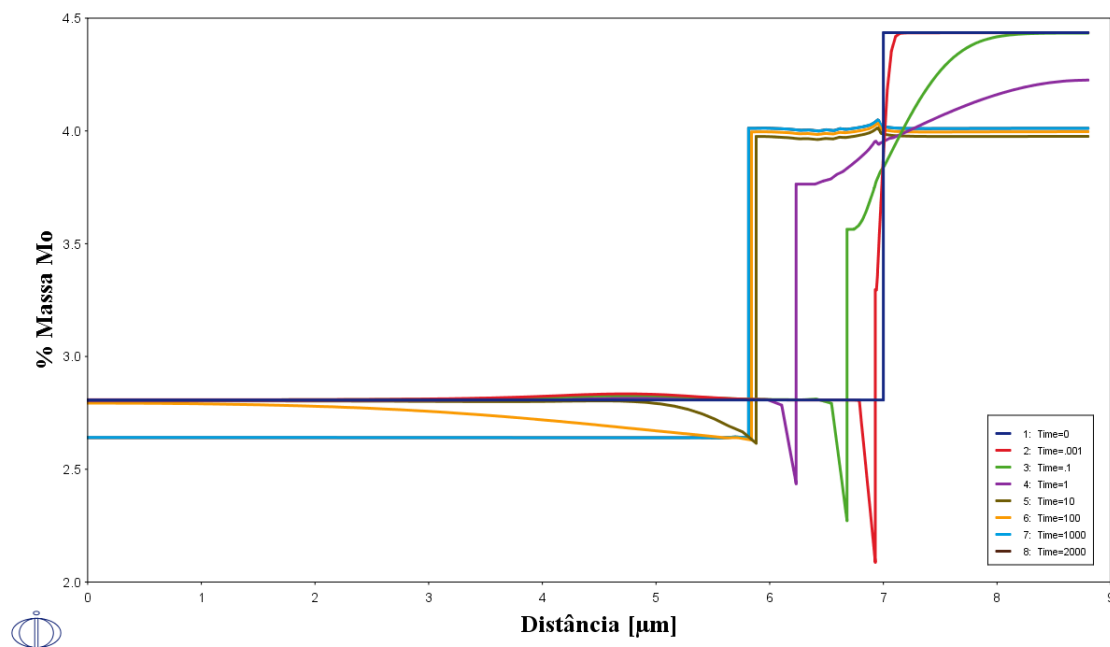
Fonte: Autora.

Figura 78 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.



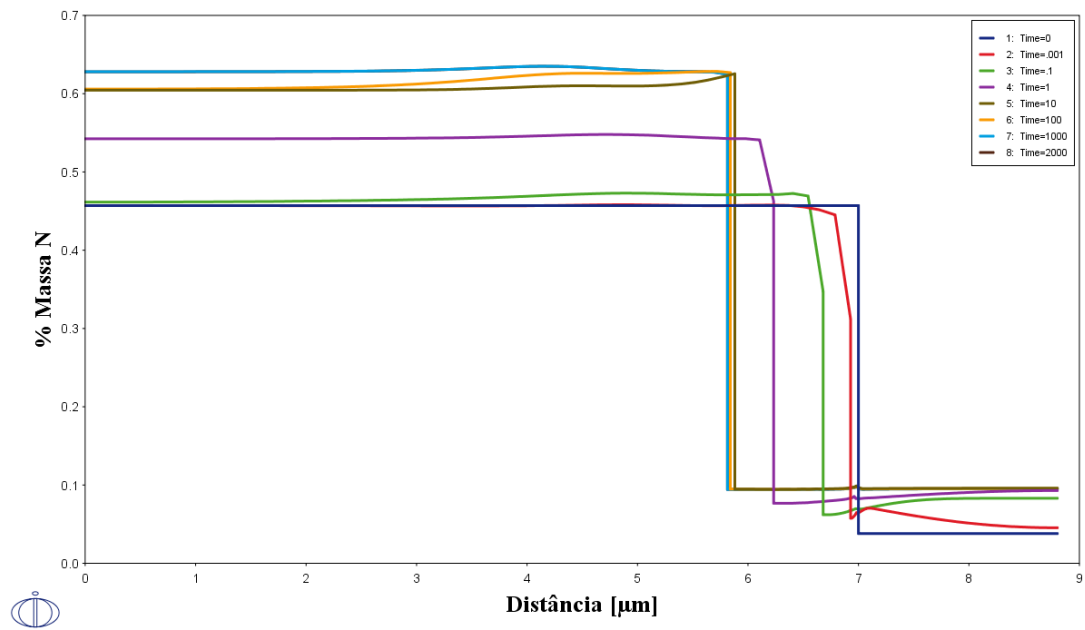
Fonte: Autora.

Figura 79 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.



Fonte: Autora.

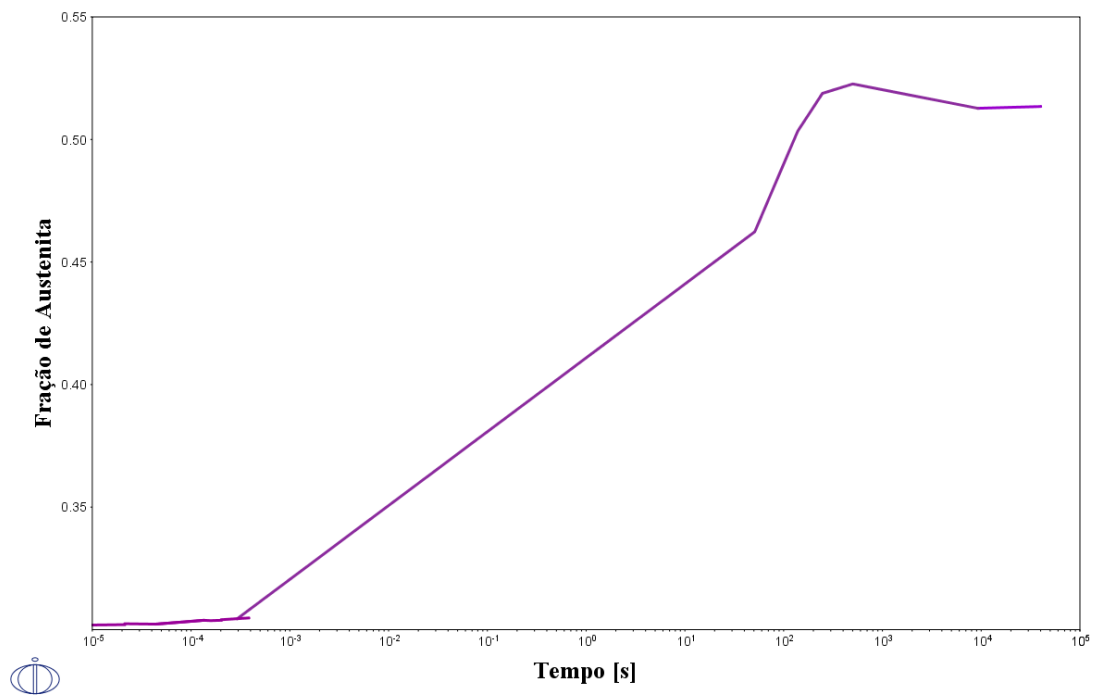
Figura 80 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1250°C.



Fonte: Autora.

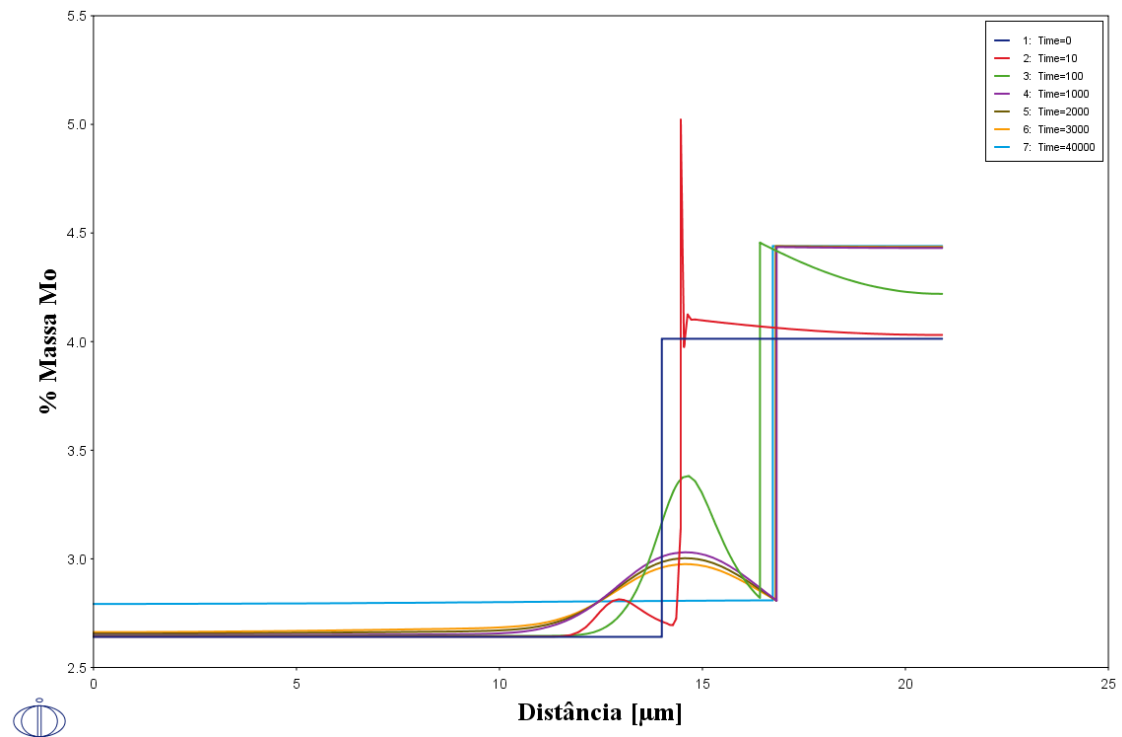
APÊNDICE C – MODELO GEOMÉTRICO ESFÉRICO, TRATAMENTO TÉRMICO DE SOLUBILIZAÇÃO PARA ESTRUTURA DÚPLEX.

Figura 81 – Fração de austenita em função do tempo, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.



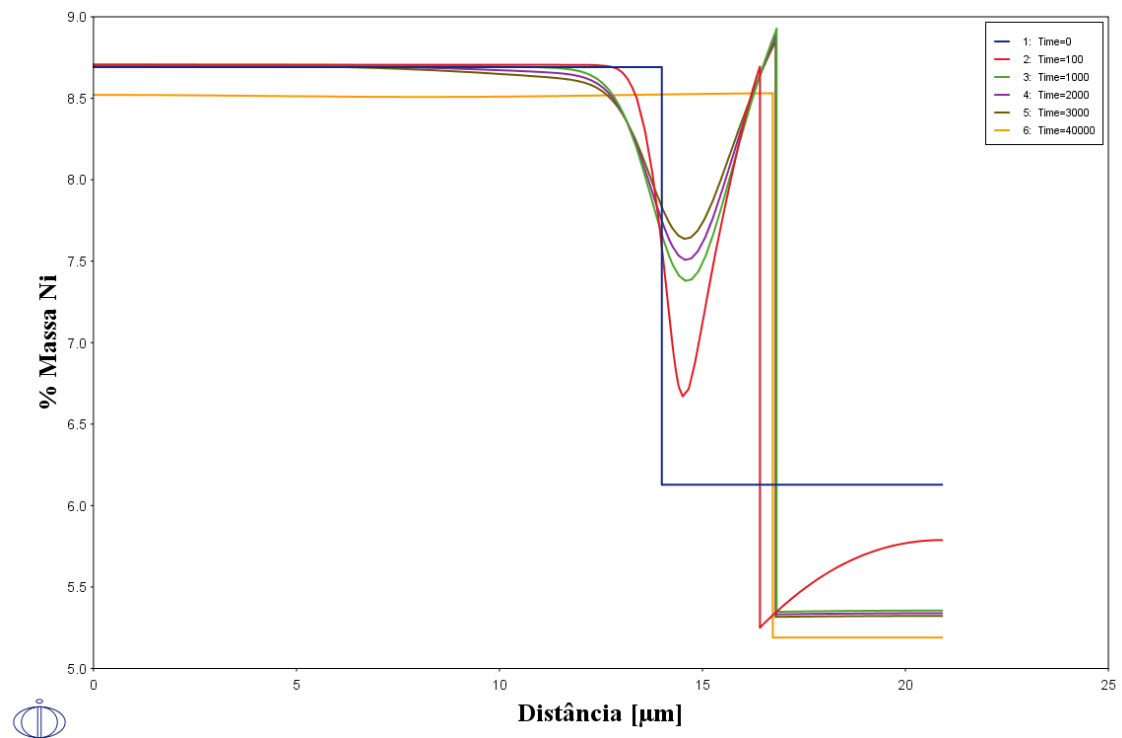
Fonte: Autora.

Figura 82 – Variação da % em massa de Mo em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.



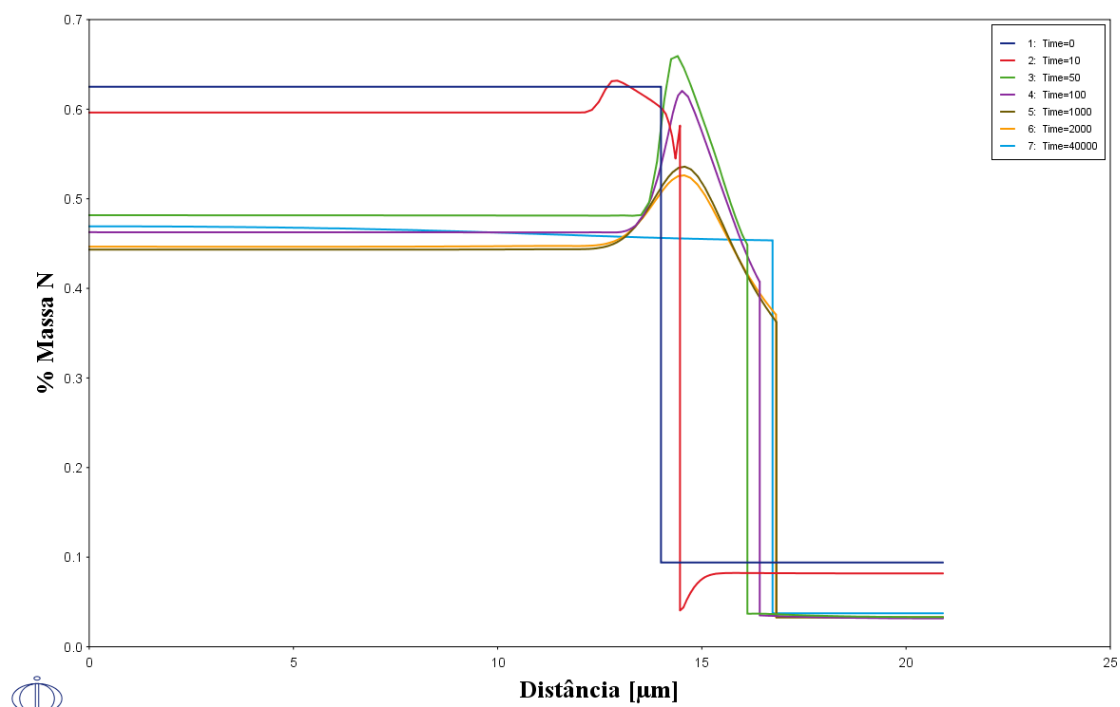
Fonte: Autora.

Figura 83 – Variação da % em massa de Ni em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.



Fonte: Autora.

Figura 84 – Variação da % em massa de N em função da distância, modelo 1, geometria esférica a 1084°C.



Fonte: Autora.