

Projeto de Pesquisa

**PREVISÃO DA FASES PRESENTES EM
MICROESTRUTURA BRUTA DE FUSÃO DE
FERROS FUNDIDOS USANDO O DICTRA®**

Proponente: Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco

rodrmagn@fei.edu.br

candidata a bolsa: Renata Caroline Mota Santos
renata_cms@hotmail.com
n° FEI: 11.115.059-5

Departamento de Engenharia de Materiais

Centro Universitário FEI

Fundação Educacional Inaciana Pe. Sabóia de Medeiros

15 de agosto de 2019

RESUMO

As propriedades e o processamento dos ferros fundidos são fortemente dependentes da presença de grafita ou cementita, e portanto a capacidade de previsão de formação destas fases numa dada composição e taxa de resfriamento a partir do líquido são fundamentais para o controle do processo e sua otimização. Os dois parâmetros reconhecidamente mais influentes na determinação de qual fase rica em carbono se formará na solidificação, grafita ou cementita, são o teor de silício e a taxa de resfriamento. Assim, o objetivo deste projeto de iniciação científica é avaliar a possibilidade de previsão das fases formadas na estrutura bruta de fusão de ferros fundidos usando simulações computacionais em DICTRA®, descrevendo a influência dos teores de C e Si e das taxas de resfriamento impostas ao líquido.

Palavras-chave: ferros fundidos, solidificação, simulação computacional, ThermoCalc, DICTRA.

1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA, COM SÍNTESE DA BIBLIOGRAFIA FUNDAMENTAL

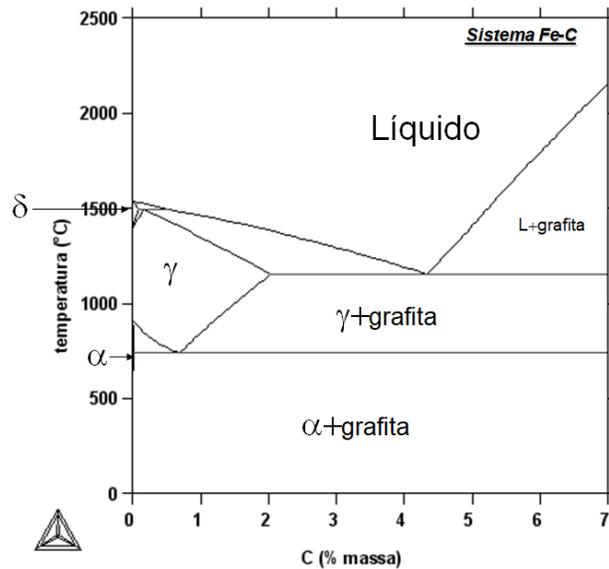
O primeiro artefato de ferro fundido registrado é a estátua chinesa de um leão, datada de 502 AC; apesar disso, os primeiros registros de produção de ferros fundidos na Europa remontam uma época entre os séculos XIII e VX (STEFANESCU, 2005), e o primeiro registro literário do estado da arte da metalurgia se dá com a obra *De re metallica*, de 1556 (AGRICOLA, 1950). Fundamentais para a revolução industrial e ainda hoje um dos principais materiais de construção mecânica, os ferros fundidos são comumente classificados como as ligas do sistema Fe-C de composição próxima a eutética, ou ainda como ligas com mais de 2% de C em sua composição (COLPAERT, 2008).

As ligas que apresentam composições eutéticas, que tem seu nome originado da palavra grega *eutektos* (fusão fácil) como descrito em Hummel (1997) são amplamente utilizadas na obtenção de materiais a partir do seu estado líquido, e que são utilizados em sua estrutura bruta de fusão. Assim, a compreensão e a possibilidade de previsão de quais fases serão formadas após o término da solidificação é fundamental para o domínio do processamento destes materiais usando as habilidades da Ciência e Engenharia de Materiais, que buscam o domínio das relações entre estrutura, processamento, propriedades e desempenho.

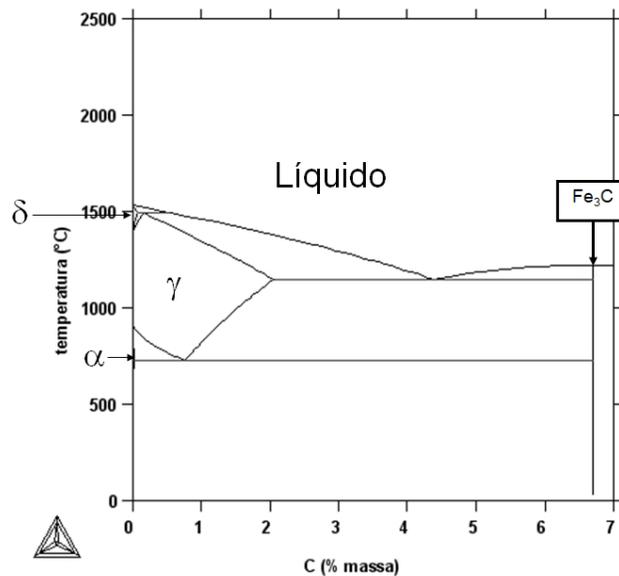
O sistema Fe-C tem seu patamar eutético a 1153 °C, e nesta temperatura tem-se o equilíbrio de 3 fases, o líquido de composição dita eutética, Fe-4,34%C, austenita (ferro γ , de estrutura CFC, que nestas condições apresenta sua máxima solubilidade de C, Fe-2,03%C) e grafita, como mostrado na Figura 1a. Este é o chamado equilíbrio estável do sistema Fe-C. Todavia, se as condições de transformação de fases dificultarem a formação da fase rica em C estável (a grafita), equilíbrio metaestável pode se desenvolver, e na temperatura eutética, que nestas condições passa a ser 1148 °C, o líquido eutético, agora de composição Fe-

4,38%C, estará em equilíbrio com a austenita de composição Fe-2,05%C e o carboneto do tipo Fe_3C , conhecido como cementita, como mostra a Figura 1b.

Figura 1. Diagramas Fe-C obtidos com auxílio do software ThermoCalc® e a base de dados TCBIN: (a) equilíbrio estável, com formação de grafita, (b) equilíbrio metaestável, com formação de cementita (Fe_3C).



(a)



(b)

Fonte: Autor

Da observação da Figura 1, pode se compreender o motivo para outra popular definição dos ferros fundidos, que são ligas Fe com no mínimo 2% de C (COLPAERT, 2008), ou seja, que solidificam em composições onde sempre se cruza o patamar eutético no resfriamento, nunca havendo a possibilidade de formação de uma única fase sólida ao término da solidificação. Isto implica em estruturas que sempre terão microconstituente eutético (formado por duas fases sólidas a partir do líquido de composição eutética). Além disso, como a fluidez das ligas é facilitada quando as composições são próximas a eutética, comumente os ferros fundidos tem suas composições próximas ao eutético.

Ferros fundidos contendo grafita (que solidificam obedecendo o equilíbrio estável, Figura 1a) apresentam características de processamento únicas, como facilidade de fundição, conferida pela fluidez das ligas, baixo custo, e densidade da grafita inferior inclusive a das ligas no estado líquido, o que impede a formação de rechupes e praticamente elimina a possibilidade de porosidades advindas da solidificação. Além disso, a presença de grafita na microestrutura típica de veios formada na solidificação do eutético torna estes materiais de fácil usinagem, e confere boa condutividade térmica, e grande capacidade de amortecimento de vibrações (CALLISTER, 2015). Como a grafita é uma fase frágil, a fratura dos ferros fundidos que a contém na típica estrutura de veios contínuos ocorre por esta fase, dando aspecto acinzentado a fratura, de onde vem a denominação desta classe de materiais, ferros fundidos cinzentos.

Já os ferros fundidos contendo cementita, que solidificam obedecendo o equilíbrio estável, Figura 1b, tem por principais características a alta dureza associada a cementita, sendo utilizados apenas em peças que necessitem elevada resistência ao desgaste, mas que não passarão por processos de usinagem. A fratura destes materiais se propaga preferencialmente por esta fase frágil, mas a cementita se torna brilhante, dando aspecto branco a fratura, e deste modo ferros fundidos que contém cementita como a fase rica em C são chamados de ferros

fundidos brancos.

Como as propriedades e o processamento dos ferros fundidos são fortemente dependentes da presença de grafita ou cementita, a capacidade de previsão de formação destas fases numa dada composição e taxa de resfriamento a partir do líquido são fundamentais para o controle do processo e sua otimização. Os dois parâmetros reconhecidamente mais influentes na determinação de qual fase rica em carbono se formará na solidificação, grafita ou cementita, são o teor de silício e a taxa de resfriamento.

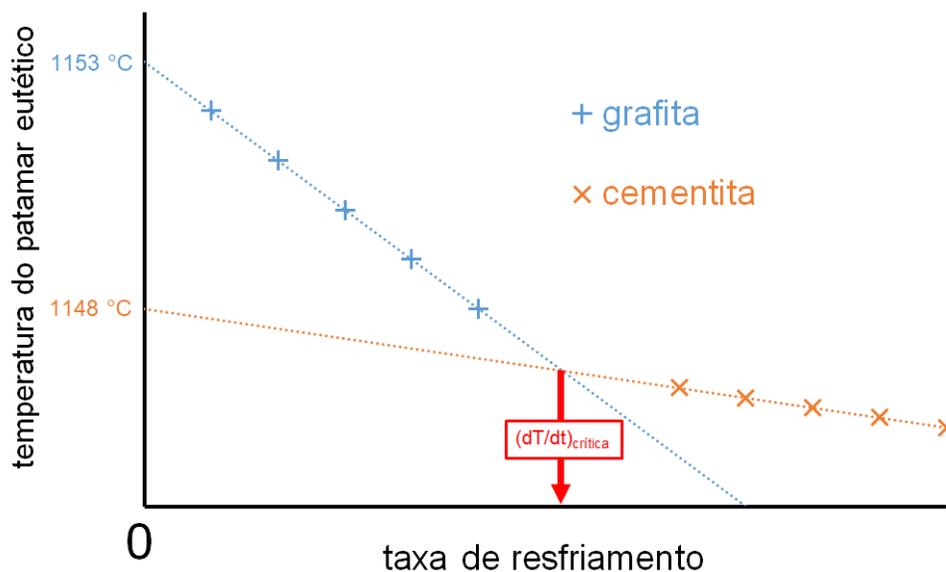
Conforme relata Stefanescu (2005) em excelente revisão da literatura sobre a solidificação de ferros fundidos, o trabalho pioneiro de Ledebur em 1892 sobre a estrutura de ferros fundidos já apontava que teores crescentes de Si favorecem a formação de grafita, sendo considerado até os dias atuais um elemento com alto poder de grafitização da microestrutura. De fato, as típicas composições químicas de ferros fundidos brancos tem, comumente, menores teores de Si que os ferros fundidos cinzentos (COLPAERT, 2008).

Todavia, o efeito da taxa de resfriamento é apontado como primordial para a definição de qual transformação eutética ocorrerá num ferro fundido. Sabendo que a transformação eutética é uma transformação invariante, ou que ocorre numa mesma temperatura durante o resfriamento, criando um patamar numa curva de resfriamento, a determinação desta temperatura pode se dar num calorímetro, impondo a líquidos de composição eutética diferentes taxas de resfriamento. O registro de diferentes temperaturas de patamar em função da taxa de resfriamento imposta resultaria numa situação como a apresentada na Figura 2. A temperatura de equilíbrio da transformação de um diagrama de fases seria aquela obtida a partir da extrapolação dos dados de temperatura de patamar em diferentes taxas de resfriamento, obtendo-se a temperatura para uma taxa de resfriamento nula.

No esquema da figura 2 são apresentados dados de temperatura de patamar

relacionados a observação da fase rica em carbono observada nas amostras. Nota-se que a menores taxas de resfriamento a grafita é a fase formada, ao passo que maiores taxas de resfriamento levam a formação de cementita. Assim, existe uma taxa de resfriamento crítica $(dT/dt)_{crítica}$, acima da qual a formação de grafita é impedida, e abaixo da qual não há probabilidade de formação de cementita.

Figura 2. Representação esquemática da influência da taxa de resfriamento na temperatura de patamar eutético do sistema Fe-C, com fases ricas em carbono formadas em destaque.

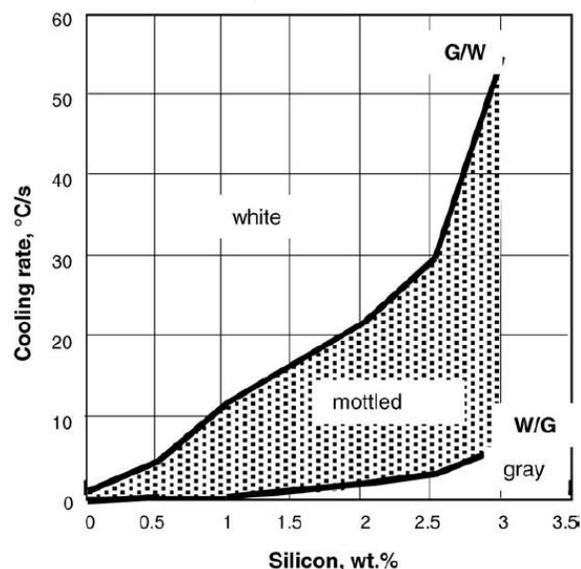


Fonte: Autor, adaptado de (STEFANESCU, 2005)

Inúmeros trabalhos (KRAUSE, 1969; NASTAC, STEFANESCU, 1995; FRAS et al, 2005a; FRAS et al, 2005b; FRAS et al, 2005c; STEFANESCU, 2005; FRÁS, GÓRNY, 2007; SILVA et al, 2014) reportam o efeito da taxa de resfriamento e do teor de silício na transição de microestruturas compostas apenas por grafita como fase rica em C para estruturas compostas por cementita. Fica claro que o projeto do molde de fundição pode impor diferentes taxas de resfriamento ao líquido, e deste modo é preciso conhecimento preciso da taxa de resfriamento crítica $(dT/dt)_{crítica}$ indicada na Figura 2 para a previsão das fases presentes na microestrutura bruta

de fusão. Stefanescu (2005) apresenta dados de taxas de resfriamento na Figura 3 para a obtenção de ferros fundidos apenas com estrutura contendo cementita (branco, white), apenas com estrutura contendo grafita (cinzento, gray) e estruturas mescladas (mottled) para um ferro fundido de composição Fe-3,6%C, em função de diferentes teores de silício.

Figura 3. Influência do teor de silício e taxa de resfriamento na transição entre estruturas contendo cementita (white) ou grafita (gray) num ferro fundido de composição Fe-3,6%C.



Fonte: (STEFANESCU, 2005)

Deste modo, a possibilidade de previsão das fases formadas na estrutura bruta de fusão de ferros fundidos, avaliando as diferenças composicionais presentes na prática de seleção e/ou processamento dos ferros fundidos, e a ocorrência de diferentes taxas de resfriamento, é de extrema valia na produção deste tão importante material de engenharia. Assim este projeto visa avaliar a possibilidade de realizar simulações computacionais das transformações de fase durante a solidificação de ferros fundidos utilizando as ferramentas ThermoCalc® e DICTRA®, especificamente descrevendo a influência dos teores de C e Si e das taxas de resfriamento impostas ao líquido na formação das fases presentes nas

estruturas brutas de fusão.

O proponente deste projeto realizou alguns testes de simulação utilizando célula computacional com difusão unidirecional e perpendicular às interfaces de uma região de líquido de 200 μm de comprimento inicial. Na interface esquerda, se permitiu a formação de grafita e/ou cementita, e na interface direita se permitiu a formação de austenita, desde que, em qualquer um dos casos, existisse potencial termodinâmico (diferença absoluta de energia livre de Gibbs entre a situação contendo apenas líquido e a situação contendo líquido e uma das fases citadas) que excedesse o valor de $10^{-5} RT$, sendo R a constante universal dos gases (8,314 J/mol.K) e T a temperatura absoluta no instante da transformação (em K). Na Figura 4 encontram-se os dados de fração de austenita e grafita obtidos para uma liga Fe-3,8%C-3%Si resfriada a partir de 1400 °C a uma taxa de 200 °C/h. Na Figura 5, resultados para uma liga Fe-3,8%C resfriada a partir de 1400 °C a uma taxa de 600 °C/h são apresentadas. Nesta, há apenas formação incipiente de grafita, com domínio de formação de cementita como a fase rica em carbono, mostrando a viabilidade de simulação em DICTRA® das fases a formar em função do teor de silício e da taxa de resfriamento. Entender os limites desta simulação, as possibilidades computacionais, e a influência destes dois parâmetros em ferros fundidos de diferentes teores de carbono são o objeto de estudo desta proposta.

Figura 4. Fração de austenita e grafita em função do tempo de resfriamento a partir de 1400 °C a uma taxa de 200 °C/h obtidos em DICTRA® e com o uso das bases de dados TCFE9 e MOBFE4 para uma liga Fe-3,8%C-3%Si.

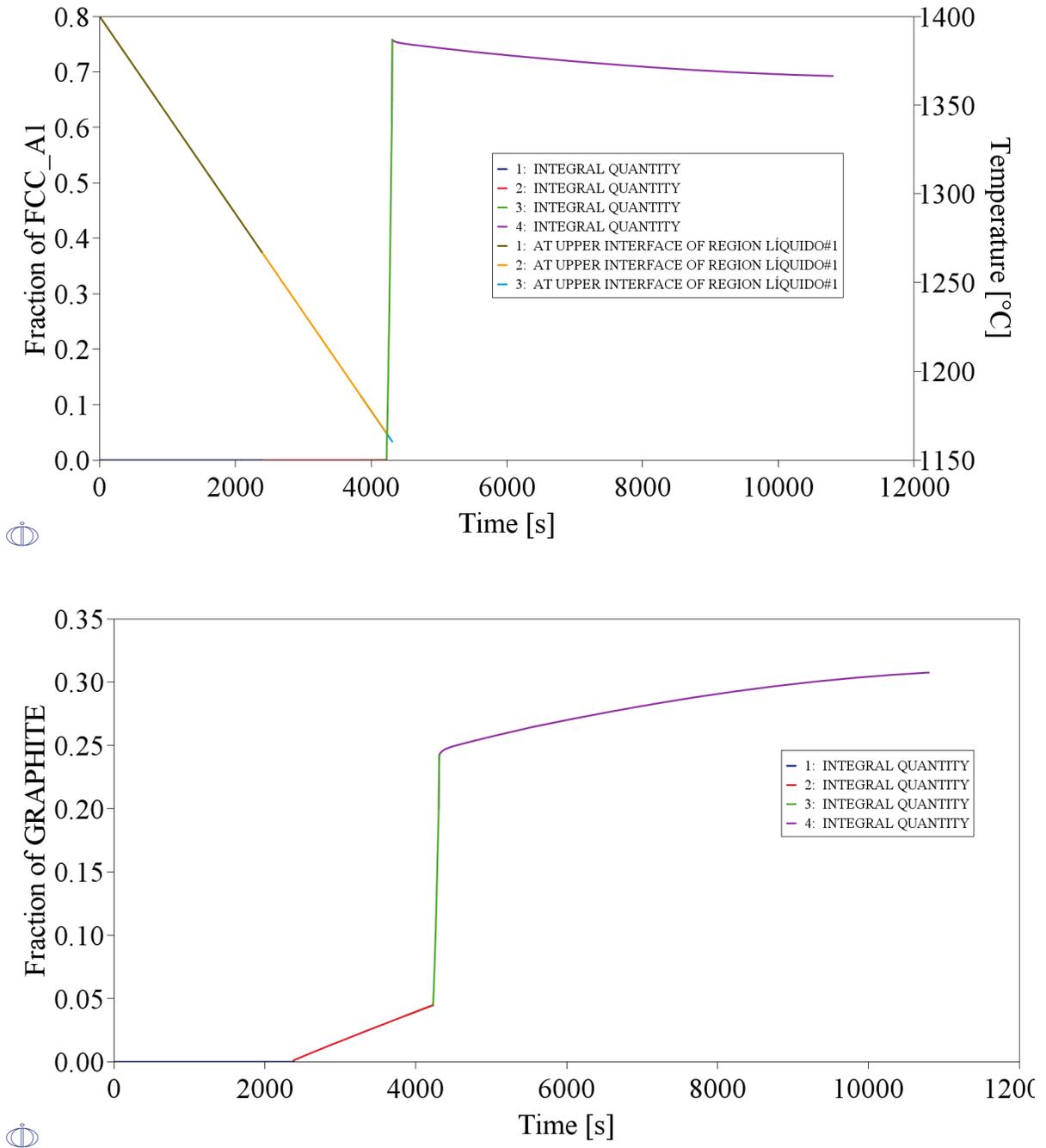
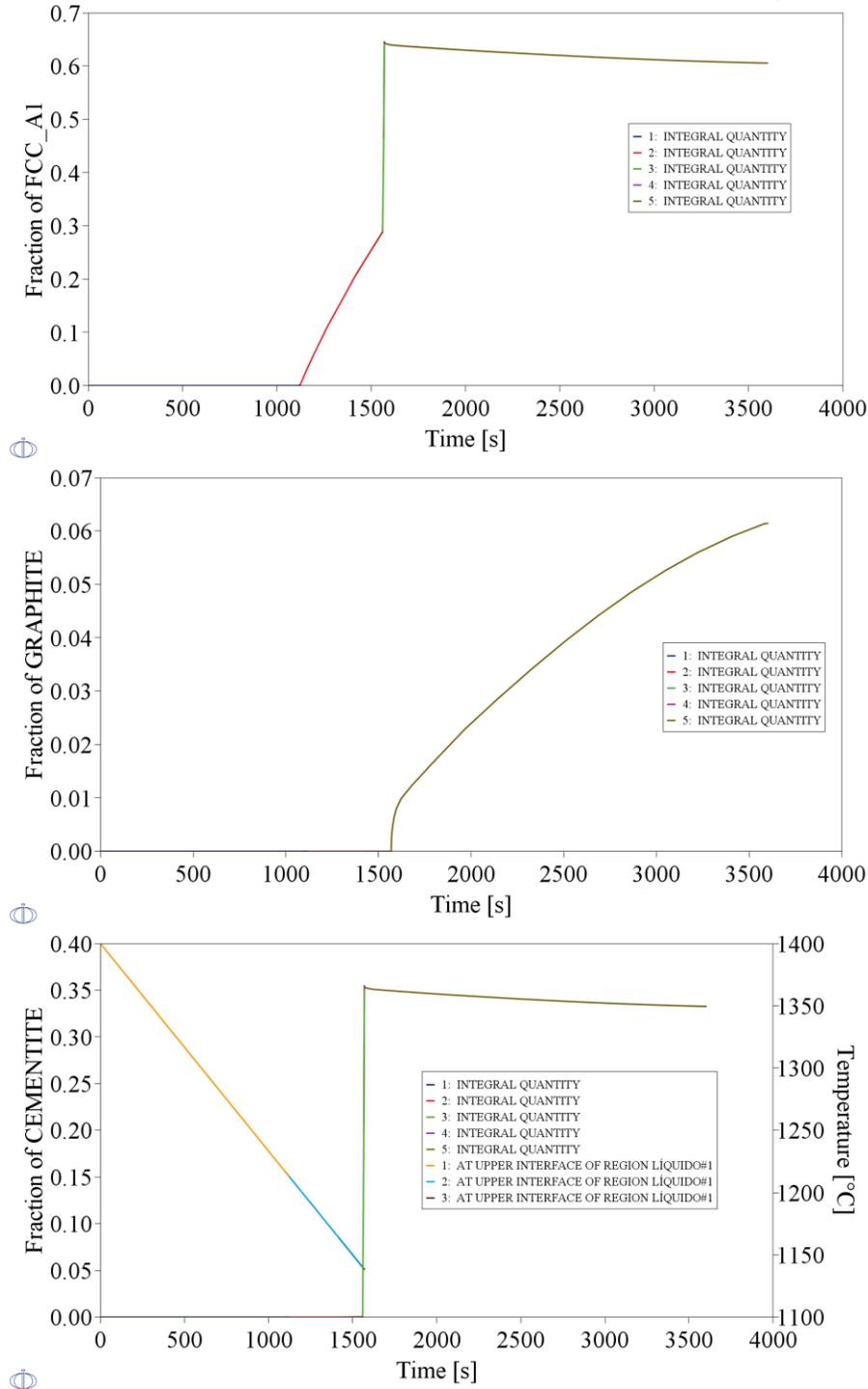


Figura 5. Fração de austenita, grafita e cementita em função do tempo de resfriamento a partir de 1400 °C a uma taxa de 600 °C/h obtidos em DICTRA® e com o uso das bases de dados TCFE9 e MOBFE4 para uma liga Fe-3,8%C.



2. OBJETIVOS

O objetivo deste projeto de iniciação científica é avaliar a possibilidade de previsão das fases formadas na estrutura bruta de fusão de ferros fundidos usando simulações computacionais em DICTRA®, descrevendo a influência dos teores de C e Si e das taxas de resfriamento impostas ao líquido.

3. METODOLOGIA E CRONOGRAMA

As atividades deste trabalho serão realizadas em quatro grandes etapas, descritas nos itens a seguir, de acordo com o cronograma global de atividades descrito na Tabela 2.

A. Revisão da literatura: a bolsista que conduzirá o projeto deverá realizar revisão crítica da literatura, com o objetivo de contextualizar a importância de se conhecer as transformações de fase envolvidas na solidificação de ferros fundidos com ou sem adições de Si, e em diferentes taxas de resfriamento, e sua influência no estabelecimento dos modelos para simulação computacional em DICTRA®. Por esse motivo, também revisão sobre a metodologia de simulação computacional em DICTRA® se faz necessária, e é esperada.

B. Determinação do equilíbrio termodinâmico: nesta etapa objetiva-se a determinação do equilíbrio termodinâmico através de simulação computacional, utilizando o software ThermoCalc® e bases de dados dedicadas. Esta etapa é necessária para definição das temperaturas possíveis de processamento das ligas

a estudar, as quais balizarão as condições de simulação de cinética de transformação de fases, a seguir descritas.

C. Simulações de cinética de transformação de fases: determinadas as temperaturas *liquidus* e *solidus* das ligas a estudar, e as temperaturas de transformação eutética, serão realizadas simulações da cinética de transformação de fases utilizando o software DICTRA® e bases de dados dedicadas. A princípio, será utilizado o mesmo modelo testado pelo proponente, de célula computacional com difusão unidirecional e perpendicular às interfaces de uma região de líquido de 200 µm de comprimento inicial. Na interface esquerda, se permitirá a formação de grafita e/ou cementita, e na interface direita se permitirá a formação de austenita, desde que, em qualquer um dos casos, exista potencial termodinâmico (diferença absoluta de energia livre de Gibbs entre a situação contendo apenas líquido e a situação contendo líquido e uma das fases citadas) que exceda o valor de $10^{-5} RT$, sendo R a constante universal dos gases (8,314 J/mol.K) e T a temperatura absoluta (em K). Nestes modelos, serão testados diferentes teores de C, em composições hipoeutéticas, eutéticas e hipereutéticas, na ausência de Si e na presença de pelo menos 3 diferentes teores de Si, em pelo menos 5 taxas de resfriamento distintas. Assim, será possível atingir o objetivo de projeto, que é avaliar a possibilidade de previsão das fases formadas na estrutura bruta de fusão de ferros fundidos usando DICTRA®, descrevendo a influência dos teores de C e Si e das taxas de resfriamento impostas ao líquido.

D. Elaboração de relatórios parciais (indicados em suas datas de entrega por # na Tabela 1), relatório parcial e relatório final de projeto para avaliação do PIPEX (indicados em suas datas de entrega respectivamente por @ e % na Tabela 1).

Tabela 2. Cronograma de atividades do projeto.

Atividade	Duração (meses)											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
A	■	■	■	■					■	■	■	
B			■									
C				■	■		■	■	■	■	■	
D	■	#		#		@		#		#		%

REFERÊNCIAS

1. G. Agricola. De Re Metallica. Edited by Herbert Clark Hoover and Lou Henry Hoover. New York: Dover Publications. 1950
2. W. D. Callister, D. G. Rethwisch. Ciência e engenharia de materiais : uma introdução. Rio de Janeiro : LTC, 8. ed., 2015, p. 341-346
3. H. Colpaert. Metalografia dos Produtos Siderúrgicos Comuns, 4 ed. revista A. L. V. C. Silva, São Paulo : Blucher. 2008, cap. 17
4. E. Fraś, M. Górný. Mechanism of silicon influence on the chill of cast iron. Archives of foundry engineering, v. 7, 2007, p. 57-62
5. E. Fraś et al. The Transition from Gray to White Cast Iron during Solidification: Part I. Theoretical Background. Metallurgical and Materials Transactions A, v. 36A, 2005a p. 3075-3082.
6. E. Fraś et al. The Transition from Gray to White Cast Iron during Solidification: Part II. Experimental Verification. Metallurgical and Materials Transactions A, v. 36A, 2005a p. 3083-3092.
7. E. Fraś et al. The Transition from Gray to White Cast Iron during Solidification: Part III. Thermal Analysis. Metallurgical and Materials Transactions A, v. 36A, 2005a p. 3093-3101.
8. R. E. HUMMEL. Understanding materials science: history, properties, applications. New York : Springer. 1998, p. 80-84.
9. D. E. Krause. Gray iron - A unique engineering material. Gray, ductile and malleable iron castings - current capabilities, ASTM STP 455. Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1969, p. 3-28.
10. L. Nastac, D. M. Stefanescu. Prediction of the Gray-to-White Transition in Cast Iron Through Solidification Modeling. AFS Trans., v. 103, 1995, p. 329-337.
11. G. E. Silva et al. Influência da taxa de resfriamento na microestrutura de ferros fundidos. In: 69° Congresso da ABM - Internacional, 2014, São Paulo. Anais do 69° Congresso da ABM - Internacional. São Paulo: ABM, 2014, 12 p.
12. D. M. Stefanescu. Solidification and modeling of cast iron—A short history of the defining moments. Materials Science and Engineering A, v. 413–414, 2005, p. 322–333.