

Projeto de Pesquisa

**Estudo de transformações de fases envolvendo formação de fase sigma em aço  
inoxidável superdúplex UNS S83071 através de modelamento computacional e sua  
validação experimental**

Proponente: Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco

rodrmag@fei.edu.br

**Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica**

Área de concentração: Materiais e Processos

Centro Universitário FEI

Fundação Educacional Inaciana Pe. Sabóia de Medeiros

Candidata à bolsa: Renata Caroline Mota Santos

renata.mota@alleima.com

27 de fevereiro de 2023

## RESUMO

O presente projeto tem por objetivo estudar as transformações de fases envolvendo formação de fase sigma em aço inoxidável superdúplex UNS S83071 através de modelamento computacional e sua validação experimental. Pretende-se avaliar em simulações de equilíbrio termodinâmico (via ThermoCalc), e de cinética de transformações de fase controladas por difusão (via DICTRA), a evolução das frações volumétricas das fases, para posterior validação experimental em laboratório, realizando os ciclos térmicos e caracterizando as microestruturas formadas. Os dados de entrada para as simulações serão composição química do aço e fração das fases no material de partida, definida por equilíbrio termodinâmico calculado com a base de dados termodinâmica TCFE9 as composições das fases ferrita e austenita originais, e com a base de dados de mobilidade atômica MOBFE4, pretende-se obter a evolução microestrutural do aço envelhecido a 850°C, e resfriado continuamente a partir da temperatura de solubilização em 3 taxas distintas de resfriamento. A validação experimental das frações das fases obtidas será feita por meio de tratamentos térmicos em laboratório dos ciclos térmicos simulados, análise metalográfica, estereologia quantitativa, ferritoscopia, e difração de raios-X, validando o modelo computacional proposto para a previsão das alterações microestruturais.

Palavras-chave: aço inoxidável superdúplex, transformação de fases, modelamento computacional, ThermoCalc, DICTRA.

## 1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA, COM SÍNTESE DA BIBLIOGRAFIA FUNDAMENTAL

Aços inoxidáveis superdúplex (AISD) são ligas baseadas no sistema ternário de ferro (Fe), cromo (Cr) e níquel (Ni), com adições de molibdênio (Mo) e nitrogênio (N) produzidas para nobres aplicações, que incluem setores petroquímicos, aeronáuticos e de óleo e gás, visto que são altamente resistentes à corrosão, além de tenazes e mecanicamente resistentes.

Possuem microestrutura típica de ferrita e austenita composta de 50% de cada fase, ambas inoxidáveis, obtidas por meio de tratamento térmico de solubilização entre 1000°C e 1300°C, interrompido em resfriamento em água (SOLOMON; DEVINE, 1982; BAIN; GRIFFITHS, 1997; RAYNOR; RIVLIN, 1988). Além disso, são classificados como superdúplex por possuírem número de resistência equivalente a pite (PREN - *pitting resistance equivalence number*) superior a 40, a partir da combinação entre cromo, molibdênio e nitrogênio por meio da relação  $PREN = \%Cr + 3,3\%Mo + 16\%N$ , calculada empiricamente (NILSSON, 1992).

Uma nova liga proposta pela empresa Alleima, um dos principais players de aços inoxidáveis e ligas especiais, é a UNS S83071, cuja composição química típica é Fe - 0,03C - 0,50Si - 0,50-1,50Mn - 29-31Cr - 6-8Ni - 3-4Mo - 0,80Cu - 0,28-040N (ÖHLIN; GULLBERG, 2022). Também conhecido como aço 3007 (em alusão aos teores médios de Cr - 30% - e Ni - 7%), tem PREN aproximado de 47, classificando-o como superdúplex. Os elevados teores de Cr e Mo, apesar de garantirem excelente resistência a diversos tipos de corrosão, tornam este material susceptível a formação de fase sigma, criando regiões empobrecidas nestes elementos, extremamente deletérias ao comportamento eletroquímico por prejudicar a ação protetiva da película passiva (MAGNABOSCO et al, 2019; SANTOS et al, 2019; MORAIS et al, 2017).

Por se tratar de um aço termodinamicamente metaestável, deve-se estar atento em relação ao tempo e temperatura em que está sujeito, já que tenderá a buscar o equilíbrio quando receber qualquer insumo de energia (calor) podendo resultar em precipitações de fases secundárias indesejadas como a sigma, crescimento de grãos a ponto de deteriorar as propriedades mecânicas, além de perder a condição dúplex (NILSSON, 1992; PORTER; EASTERLING, 1992, LEANDRO, 2016). Logo, simulações no software DICTRA poderiam ser capazes de descrever todas as transformações de fase que ocorrem de acordo com a condição térmica enfrentada durante ciclos térmicos usuais de

fabricação. Todavia, o uso do DICTRA precisa ser validado com experimentos que permitam avaliar se as previsões da simulação refletem a realidade microestrutural formada.

Pode se utilizar o DICTRA por ser um software que simula transformações de ligas multicomponentes controladas por difusão, o qual se aproxima de condições reais através de modelos fundamentais, dados termodinâmicos e cinéticos. É capaz de equacionar o fenômeno da difusão por meio da primeira Lei de Fick, ou seja, de fluxo difusivo em estado estacionário, sem variações ao longo do tempo, ou por meio da Segunda Lei de Fick, de fluxo difusivo não estacionário, variando tanto com a distância quanto com o tempo (ANDERSSON et al, 2001).

Alimentando-se o software com dados como a geometria do modelo, as fases que se deseja estudar, a dimensão e forma 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 (BORGSTAM et al., 2000). Assim, é possível obter importantes propriedades do aço em estudo como o perfil de determinado elemento químico ao longo de uma dimensão 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, entre outros.

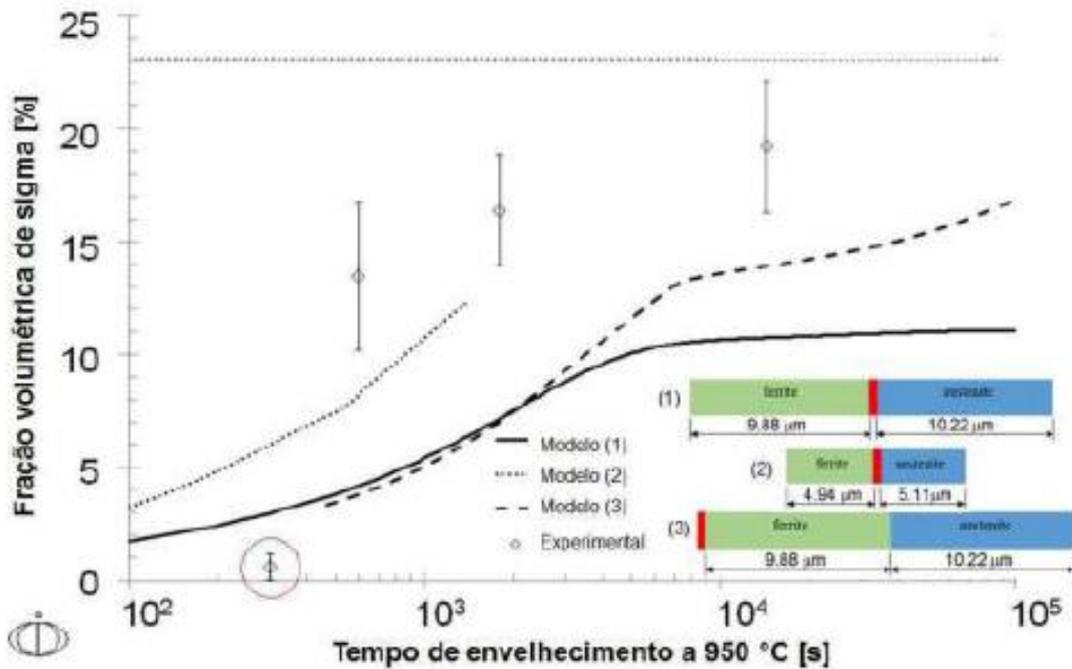
Semelhante ao que será realizado neste projeto, trabalhos recentes do grupo de pesquisa do proponente, simularam como ocorrem as transformações de fase de AISD, tanto na solubilização quanto a temperaturas de formação da fase sigma, um composto intermetálico e frágil, formado entre 650 °C e 1.000 °C (HSIEH; WU, 2012).

Morais (2017) realizou o estudo da cinética de formação de fase sigma em aços inoxidáveis dúplex. Como exemplo, na Figura 1 apresenta-se para diferentes modelos utilizando o software DICTRA e a base de dados MOB2, em que se variam tamanho das fases e interfaces entre elas, em comparação com validação experimental. Nota-se que os modelos necessitam ajustes, e portanto o estudo de estratégias de simulação, e posterior validação dos resultados, é importante.

Evolução deste trabalho é o apresentado por Magnabosco e outros (2019) no qual a previsão da fração de fase sigma pelo modelo de DICTRA proposto não só teve melhor aderência aos resultados experimentais (Figura 2a) como também pode-se usar os perfis de Cr e Mo na interface da fase sigma com a matriz (Figuras 2b e 2c) para a previsão do potencial de pite das amostras (Figura 2d), mostrando a potencialidade das simulações na

descrição da evolução microestrutural de aços inoxidáveis dúplex durante a formação de fase sigma.

Figura 1 – Fração volumétrica de sigma após envelhecimento a 950°C

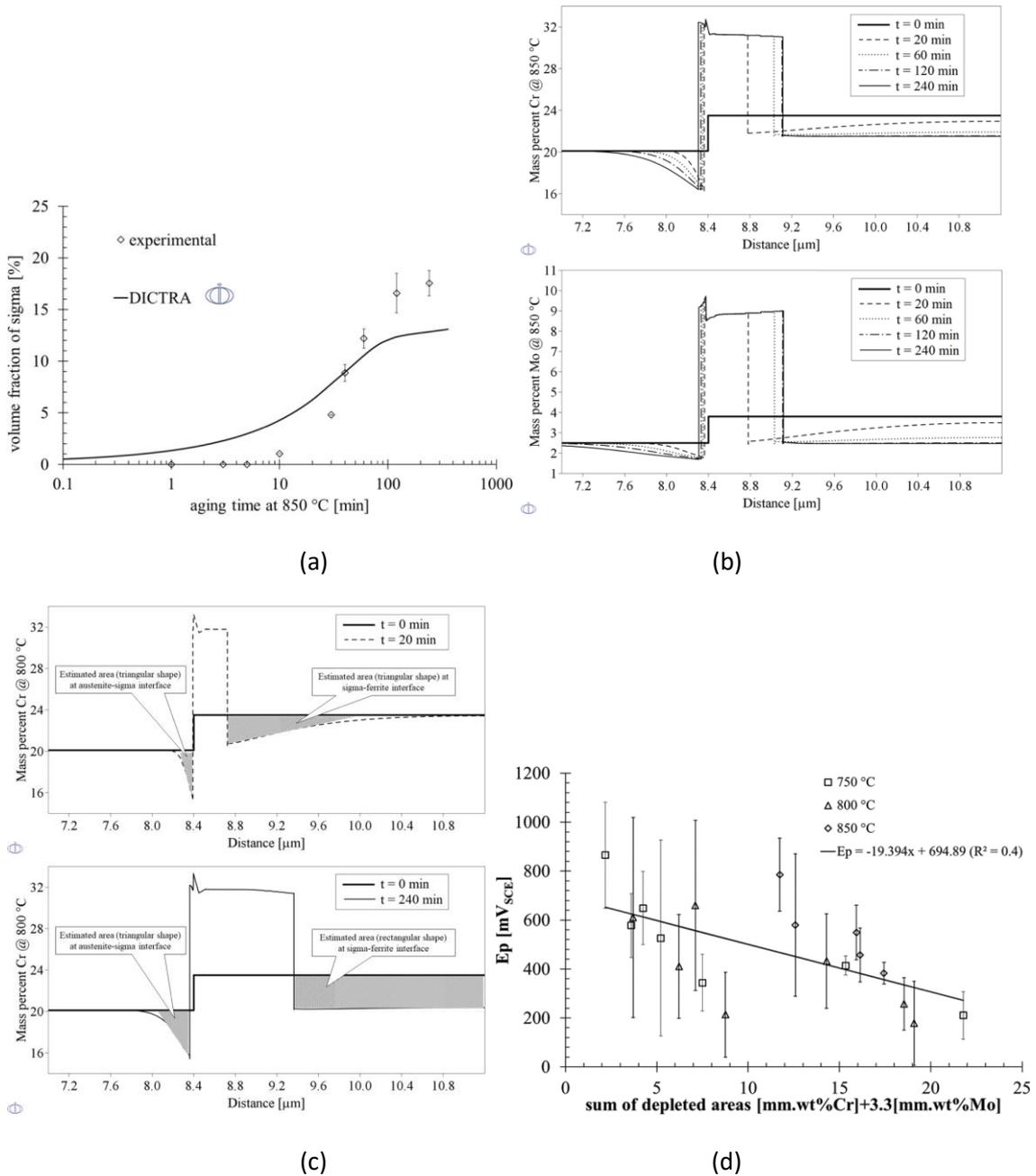


Fonte: Morais, adaptado de Magnabosco, 2017, p. 38

Legenda: (1) Tamanho da ferrita/austenita: 9,88 μm/10,22 μm e sigma na interface; (2) 4,94 μm /5,11 μm e sigma na interface; (3) 9,88 μm /10,22 μm e sigma à esquerda da ferrita

Deste modo, a validação experimental de estratégias de simulação de formação de fase sigma num aço inoxidável dúplex não usual, como o UNS S83071, permitirá maior confiabilidade no método para a previsão da evolução microestrutural e desenho de novas ligas onde os efeitos deletérios de formação de fase sigma venham a ser reduzidos ou mitigados.

Figura 2 – Exemplo de simulação da fração de fase sigma no envelhecimento isotérmico



## 2. OBJETIVOS

O presente projeto tem por objetivo estudar as transformações de fases envolvendo formação de fase sigma em aço inoxidável superdúplex UNS S83071 através de modelamento computacional e sua validação experimental. Pretende-se avaliar em simulações de equilíbrio termodinâmico (via ThermoCalc), e de cinética de transformações de fase controladas por difusão (via DICTRA), a evolução das frações

volumétricas das fases, para posterior validação experimental em laboratório, realizando os ciclos térmicos e caracterizando as microestruturas formadas.

### 3. METODOLOGIA

O aço inoxidável superdúplex a estudar, UNS S83071, será fornecido pela Alleima na condição solubilizada. O projeto será dividido nas seguintes etapas: revisão da literatura, simulação computacional, caracterização microestrutural, obtenção de créditos e elaboração da dissertação, conforme pode ser visto no cronograma da Tabela 1.

**A. Revisão da literatura:** Deverá conter uma revisão de fenômenos que ocorrem nos AISD quando estão sujeitos a temperaturas que transformam as fases durante ciclos térmicos, bem como a capacidade e importância da simulação computacional em descrevê-los, com a finalidade de se aprofundar nas técnicas e mostrar a relevância tecnológica do tema.

**B. Simulação computacional:** Os dados de entrada para as simulações serão composição química do aço e fração das fases no material de partida, definida por equilíbrio termodinâmico calculado com a base de dados termodinâmica TCFE9 as composições das fases ferrita e austenita originais, e com a base de dados de mobilidade atômica MOBFE4, pretende-se obter a evolução microestrutural do aço envelhecido a 850°C, e resfriado continuamente a partir da temperatura de solubilização em 3 taxas distintas de resfriamento

**C. Caracterização microestrutural:** Será feito o corte de amostras do aço, já na condição dúplex, as quais sofrerão tratamentos térmicos que reproduzam os ciclos térmicos simulados no DICTRA na etapa anteriormente descrita. Em seguida, as amostras serão embutidas em baquelite, separando-se uma amostra de cada etapa descrita, preparadas para análise metalográfica por meio de lixamento, polimento e ataque químico com o reagente Beraha modificado, para caracterização por micrografia e estereologia quantitativa em microscopia óptica (MO). Amostras apenas polidas serão utilizadas para

determinação da fração de ferrita ferritoscopia, e para determinação das fases presentes por difração de raios-X.

**D. Obtenção de créditos:** A candidata selecionada deverá obter créditos em disciplinas do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, na área de concentração de materiais e processos, do Centro Universitário FEI, as quais darão o embasamento teórico e metodologia científica necessária para o desenvolvimento do projeto proposto e elaboração da dissertação de mestrado.

**E. Elaboração de dissertação:** Sob orientação do proponente, a candidata deverá elaborar a dissertação de mestrado a partir da revisão crítica da literatura e objetivos propostos, além de análise e revisão dos resultados, produzindo textos para a qualificação, preferencialmente em #, e defesa da dissertação final prevista para &, conforme indicado no cronograma da Tabela 1

Tabela 1 – Cronograma geral de atividades da presente proposta

Atividade	Duração (meses)													
	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12	13-14	15-16	17-18	19-20	21-22	23-24		
A														
B														
C														
D														
E										#				&

#### 4. FOMENTO SOLICITADO

Solicita-se bolsa de mestrado de isenção de taxas escolares para egressa com melhor média em sua graduação em Engenharia de Materiais no Centro Universitário FEI, Renata Caroline Mota Santos, orientada pelo proponente deste projeto, Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco, pelo período de 24 meses.

## REFERÊNCIAS

ANDERSSON, J-O.; HELANDER, T.; HÖGLUND, L.; SHI, P.; SUNDMAN, B. THERMO-CALC & DICTRA, Computational Tools For Materials Science, 2001.

BAIN, E. C; GRIFFITHS, W. E. **An Introduction to the Iron-Chromium Nickel Alloys** Trans. AIME, n.75, p.166-213, 1927.

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.

HSIEH, C.; WU, W. **Overview of intermetallic sigma ( $\sigma$ ) phase precipitation in stainless steels**. ISRN Metallurgy, v. 2012, p. 1- 16.

FIORANTE, M. T. **Validação experimental dos modelamentos computacionais de ciclos térmicos de solubilização de um aço inoxidável superdúplex**, 2018. Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo.

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/~rodrmag/mestrado/2016/VF\\_Rafael\\_Malagutti\\_Leandro.pdf](http://fei.edu.br/~rodrmag/mestrado/2016/VF_Rafael_Malagutti_Leandro.pdf)>. 02 setembro 2017

MAGNABOSCO, R.; MORAIS, L. C.; SANTOS, D. C.. **Use of composition profiles near sigma phase for assessment of localized corrosion resistance in a duplex stainless steel**. CALPHAD-COMPUTER COUPLING OF PHASE DIAGRAMS AND THERMOCHEMISTRY, v. 64, p. 126-130, 2019.

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.

MORAIS, LUARA DA COSTA ; Magnabosco, Rodrigo . **Experimental investigations and DICTRA ® simulation of sigma phase formation in a duplex stainless steel**. CALPHAD-COMPUTER COUPLING OF PHASE DIAGRAMS AND THERMOCHEMISTRY, v. 58, p. 214-218, 2017.

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

ÖHLIN, O.; GULBERG, D. **Corrosion Properties of UNS S83071, Super Duplex Stainless Steel with High Acid Corrosion Resistance**. NACE AMPP, Texas, 2022.

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

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

SANTOS, D.C ; MACARRAO, I. M. ; R. Magnabosco . **Relation Between Pitting Potential and PREN Values for Ferrite and Austenite in Duplex Stainless Steels**. Berg Huettenmaenn Monatsh, v. 165, p. 46-50, 2019.

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.