

# AVALIAÇÃO TERMODINÂMICA DE AÇOS COM ALTO TEOR DE ALUMÍNIO\*

*Paola Lazari de Aguiar<sup>1</sup>*

*Christien Guisard Hauegen<sup>2</sup>*

*Fábio Lopes Pinto<sup>3</sup>*

*Márcio Frazão Guimarães Lins<sup>4</sup>*

*André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva<sup>5</sup>*

## Resumo

A indústria automobilística, principalmente, tem exigido o desenvolvimento de novos materiais que permitam a redução do peso dos veículos devido ao impacto do peso no consumo de combustíveis e emissão de poluentes. Assim, novos estudos têm sido realizados visando a redução da densidade dos aços através de adições consideráveis de alumínio. Neste contexto, este trabalho discute e revê a possibilidade de projetar aços contendo teores consideráveis de alumínio, e outros elementos de liga como Mn e C, através da termodinâmica computacional e bancos de dados comerciais. Como verificação preliminar, foram avaliados, experimentalmente, alguns equilíbrios e medidas de frações de fases em um aço experimental e os resultados obtidos foram comparados com os valores calculados e informações da literatura. Os resultados indicam que, para uma ampla faixa de composições os bancos de dados comerciais disponíveis parecem adequados ao projeto destas ligas.

**Palavras-chave:** Sistema Fe-Al-Mn-C, Thermo-Calc, Termodinâmica Computacional.

## THERMODYNAMIC EVALUATION OF HIGH ALUMINUM STEELS

### Abstract

The automotive industry, mostly, demands the development of new materials that will make possible vehicle weight reduction due to the impact of weight on fuel consumption and gas emission. Thus, new alloys are under evaluation to reduce the density of the steel through the addition of significant amount of aluminum. This work discusses and reviews the possibility of designing steels containing considerable amounts of aluminum, and other alloying elements such as Mn and C, using computational thermodynamics and commercial databases. As a preliminary evaluation, some equilibria including phase fractions were studied both experimentally and via calculations. The results obtained were compared with the literature. The results indicated that for a wide range of compositions the available commercial databases seem to be adequate for alloy design.

**Keywords:** Fe-Al-Mn-C system; Thermo-Calc; Computational thermodynamics.

*1 Aluna de Mestrado em Engenharia Metalúrgica, EEIMVR-UFF, Volta Redonda, RJ*

*2 Engenheiro Metalurgista, Mestre, Companhia Siderúrgica Nacional, Volta Redonda, RJ*

*3 Engenheiro Metalurgista, Mestre, Companhia Siderúrgica Nacional, Volta Redonda, RJ*

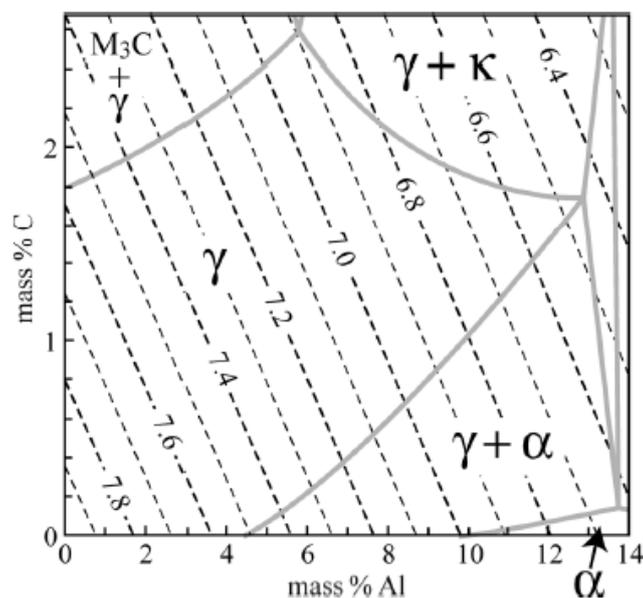
*4 Assessor de Diretoria, Companhia Siderúrgica Nacional, Volta Redonda, RJ*

*5 Professor Titular, PhD, EEIMVR-UFF, Volta Redonda, RJ*

## 1 INTRODUÇÃO

Aços contendo adições significativas de alumínio vêm sendo estudados nos últimos anos visando a redução de densidade do material, aliada a alta conformabilidade e alta resistência mecânica [1-3].

O alumínio já é usado na siderurgia como desoxidante, entretanto somente no final da década de 1990 seu uso como elemento de liga visando a redução da densidade começou a ser considerado [1]. O interesse por esses materiais tem aumentado significativamente, principalmente em aplicações na indústria automobilística, uma vez que a redução de peso de veículos é um fator preponderante no consumo de combustível e na emissão de poluentes. O alumínio tem sido considerado o principal elemento de liga para reduzir a densidade do aço devido ao seu grande efeito na densidade e por questões de produção e aplicabilidade [2]. Estudos mostram que em aços ferríticos a redução de densidade associada ao alumínio é significativa ( $-0.101 \text{ g cm}^{-3}$  por 1% Al) [3]. Apesar das vantagens da adição do alumínio, a adição é limitada pela possibilidade da formação de fase ordenadas que fragilizam o material. No sistema Fe-Al, por exemplo, ocorre formação de compostos intermetálicos, como  $\text{Fe}_3\text{Al}$  e  $\text{FeAl}$ . Uma alternativa importante é o desenvolvimento de composições no sistema Fe-Al-Mn-C. Em qualquer caso, o aumento do teor de alumínio leva a precipitação do carboneto-kappa,  $(\text{Fe,Mn})_3\text{AlC}_x$  que influencia significativamente as propriedades da mecânicas da liga [3-5]. Em função da microestrutura resultante, esses aços têm sido classificados como ligas ferríticas, duplex e austeníticas. Tais ligas apresentam propriedades mecânicas comparáveis a dos aços convencionais e avançados usados na indústria automobilística, aliadas a baixa densidade [1]. A Figura 1 resume estruturas de equilíbrio e as densidades estimadas para algumas composições de ligas Fe-Mn-Al-C em desenvolvimento.



**Figura 1.** Isoterma a 1100C para o sistema Fe-20Mn-Al-C. As fases presentes estão indicadas assim como a densidade estimada da austenita em  $\text{gcm}^{-3}$ . Adaptado da ref. [6]

Em vista da complexidade dos sistemas, o uso da termodinâmica computacional é eficaz para reduzir o número de experimentos necessários. Desde de cerca de 2002 os bancos de dados comerciais para aços são capazes de realizar previsões acertadas até cerca de 5% de alumínio. Mais recentemente, Chin e colaboradores [7] aprimoraram a descrição termodinâmica do sistema quaternário Fe-Mn-Al-C permitindo explicar a microestrutura formada durante a laminação de amostras de aços com teores de alumínio entre 6% e 7,3%. Zuazo e colaboradores [4] também aprimoraram as avaliações deste sistema, desenvolvendo dados mais exatos. Presentemente, o banco de dados TCFE9, da Thermo-calc, incorpora diversos destes aprimoramentos [8].

O objetivo deste trabalho é realizar uma verificação preliminar, comparando resultados experimentais de alguns equilíbrios e medidas de frações de fases em uma composição simples, em desenvolvimento, com os valores calculados e informações da literatura. Além disto, identificar e discutir possíveis áreas de aprimoramento e dificuldades no projeto destes aços através de termodinâmica computacional.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

A avaliação por termodinâmica computacional foi realizada empregando o software Thermo-Calc [9] e o banco de dados TCFE7 [10]. O material empregado para as verificações preliminares foi um aço de desenvolvimento, produzido para a CSN, com cerca de 6.5%Al, como mostra a Tabela 1.

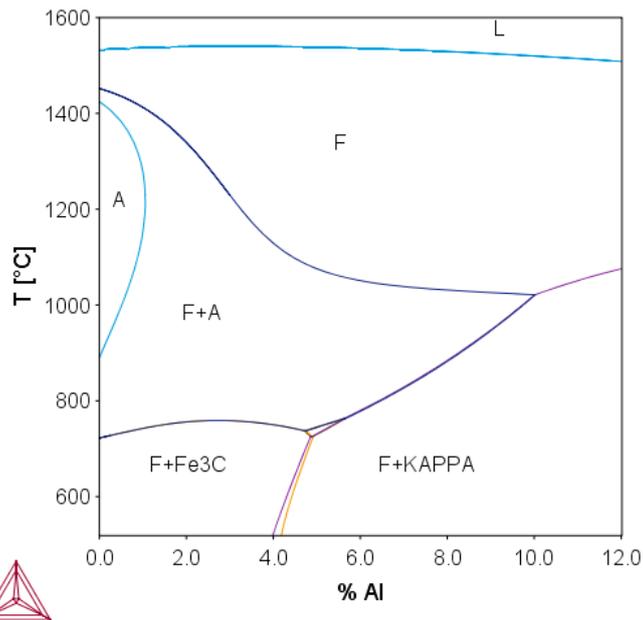
**Tabela 1.** Composição Química (% em massa)

Al	C	Mn	P	S	Cu	Si	Ni	Cr	Mo	Ti	Nb
6,47	0,042	0,159	0,018	0,014	0,0042	0,079	0,015	0,025	0,009	0,0007	0,004

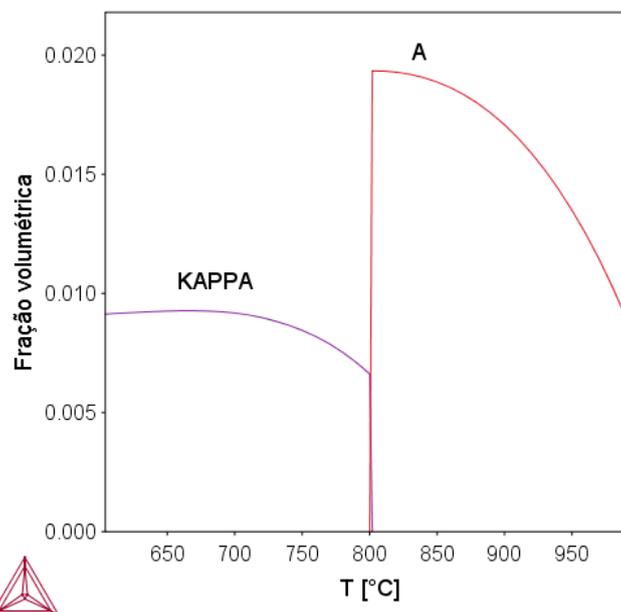
A amostra foi submetida a tratamentos térmicos em temperaturas imediatamente abaixo e acima da temperatura de transformação de fase calculada por termodinâmica computacional em forno do tipo câmara K. A microestrutura foi analisada por microscopia ótica após preparação metalográfica e a medição da fração de segunda fase, carboneto-kappa, foi feita através de metalografia quantitativa, por um software de análise de imagem. A fração volumétrica de alumina e de nitreto de alumínio, sempre presentes nestes aços [11] foi estimada e descontada.

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para orientar os tratamentos térmicos a realizar na liga da Tabela 1 foram calculados a isopleta da Figura 2, variando o teor de alumínio e um diagrama de fração de fases versus temperatura para a mesma liga, Figura 3.



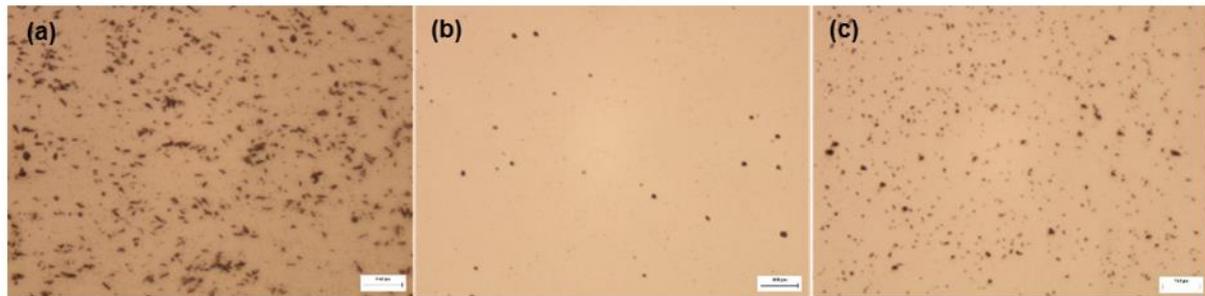
**Figura 2.** Seção isopleta calculada em torno do aço da Tabela 1, variando o teor de Al. Ferrita, Austenita, Líquido e carbonetos indicados.



**Figura 3.** Fração volumétrica de fases calculada em função da temperatura para o aço da Figura 1. A matriz é Ferrita.

Com base nestes diagramas a liga, que tem densidade de  $7,04\text{g/cm}^3$  e notável resistência a oxidação ao ar, foi submetida a um tratamento térmico a  $770^\circ\text{C}$ , abaixo da temperatura de precipitação calculada para o carboneto-kappa por 5 horas visando o crescimento dos carbonetos seguido de resfriamento rápido, e a um tratamento térmico de solubilização, acima da temperatura de precipitação ( $830^\circ\text{C}$ ) seguido por resfriamento rápido. A Figura 4 mostra as imagens feitas por microscopia ótica das amostras tratadas termicamente. A análise confirmou que a temperatura de

transformação prevista pelo cálculo termodinâmico é condizente com a microestrutura esperada para os tratamentos térmicos realizados.



**Figura 4.** (a) Amostra como recebida (b) Após tratamento de solubilização (c) Após segundo tratamento térmico de precipitação e esferoidização da fase. Ataque com Picral 4% e Nital 3%. Além de kappa, alumina e nitreto de alumínio devem estar presentes.

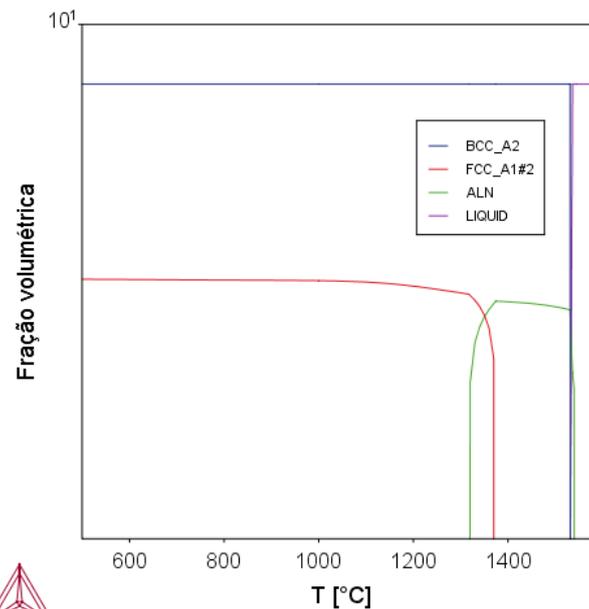
Os resultados obtidos através de metalografia quantitativa indicaram a fração de carboneto-kappa de  $9 \times 10^{-3}$  descontando a fração de inclusões de  $Al_2O_3$  e  $AlN$  observados no material após tratamento de solubilização, que é muito próxima a fração calculada a partir do banco de dados TCFE7, apresentada na Figura 3. Da mesma forma, confirmou-se que o carboneto kappa, neste aço, precipita entre estas duas temperaturas, em acordo com o calculado (Figura 2).

Com a finalidade de comparar o aço da amostra estudada neste trabalho com o aço IF analisado por Rana e colaboradores [3] que apresenta teor de alumínio similar, 6,8% Al, foi feito o cálculo de fração de fases deste aço IF, de acordo com a composição química da Tabela 2. No entanto, este aço é fortemente estabilizado com Ti, com adições da ordem de 0,1%, bastante elevada se comparado aos teores típicos em aços IF. Assim, no diagrama de fração de fase observou que ocorre a formação de carbonitreto de Ti, ou seja, a adição de Ti suprimiu a formação do carboneto kappa (Figura 5). A análise é confirmada através do cálculo apresentado na Figura 6. Ao calcular a fração de fases do aço IF sem adição de Ti, observa-se que a fase kappa aparece como fase estável para essa composição.

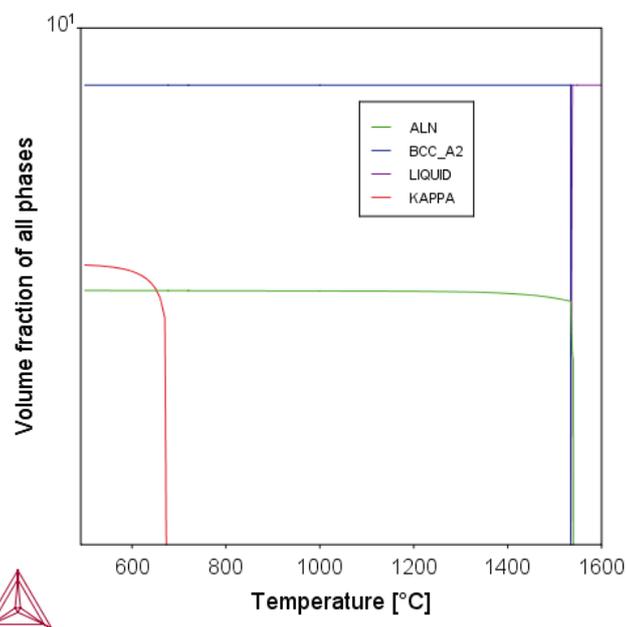
**Tabela 2.** Composição Química (% em massa)

Al	C	Mn	Ti	N
6,81	0,0035	0,10	0,101	0,004

Além da investigação das fases que podem precipitar no aço IF através do diagrama de fração de fase versus temperatura, é importante ressaltar que, para esta composição química, este aço não sofre transformação austenítica. O aço apresenta matriz ferrítica mesmo em temperaturas bastante elevadas. Esse fator é relevante para o design de rotas de processamento e controle do tamanho de grão.

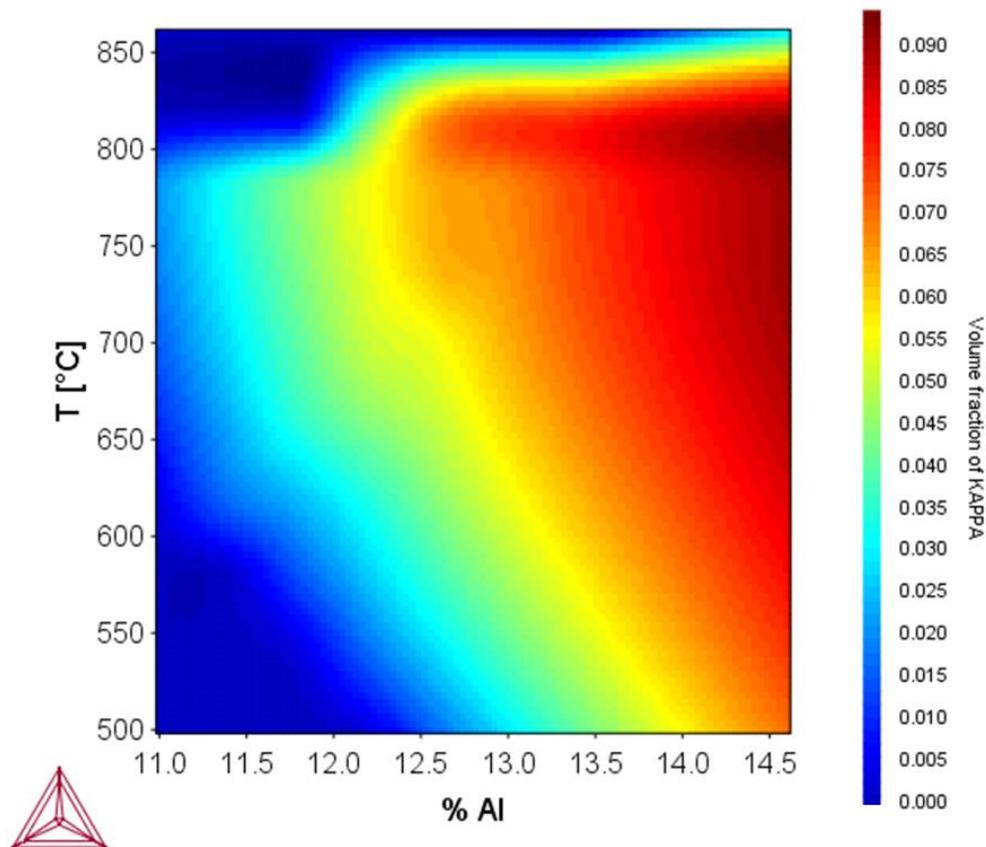


**Figura 5.** Fração volumétrica de fases em função da temperatura para o aço IF estudado por Rana e colaboradores [3].



**Figura 6.** Fração volumétrica de fases em função da temperatura para o aço IF [3], sem considerar a adição de Ti.

A figura 7 mostra de forma mais clara o efeito do alumínio na fração volumétrica de kappa em ligas do sistema Fe-Al-Mn-C. Com o aumento do teor de alumínio a fração de fase kappa aumenta consideravelmente, principalmente em temperaturas mais elevadas. Teores abaixo de 12% Al apresentam frações volumétricas razoáveis de fase kappa.



**Figura 7.** Efeito do teor de Al e da temperatura sobre a fração volumétrica da fase kappa para uma liga do sistema Fe-Al-Mn-C com 20%Mn e 1%C em massa.

Além do sistema Fe-Al, ligas do sistema Fe-Al-Mn-C têm se mostrado bastante promissoras apresentando boas propriedades mecânicas comparado com os atuais aços avançados de alta resistência para aplicação na indústria automobilística. No caso de ligas do sistema Fe-Al-Mn-C, um estudo feito por Sutou [6] e colaboradores analisou a adição de Cr para um liga com até 13% de alumínio e elevado teor de Mn visando a melhora da trabalhabilidade a frio. O trabalho mostrou que uma liga com adição de 5%Cr apresentou melhor capacidade de ser trabalhada a frio, limite de escoamento igual a 915MPa, limite de resistência igual a 1140MPa e alongamento total de 22%, alcançando uma densidade em torno de 6,43g/cm<sup>3</sup>, devido, possivelmente, a influência do cromo na formação da fase kappa. Estes resultados mostram que o banco de dados TCFE7 permite o entendimento e a previsão de propriedades dessas ligas através de cálculos das frações das fases presentes mesmo para teores de alumínio bastante elevados e a interação deste com outros elementos, como Mn.

#### 4 CONCLUSÃO

As comparações feitas entre os cálculos termodinâmicos utilizando o banco de dados TCFE7, análises experimentais e dados da literatura mostraram que, apesar do limite de adição de alumínio proposto por esse banco de dados ter sido

ultrapassado, os cálculos foram condizentes com os resultados experimentais. Uma vez que o método da tentativa e erro não é viável para o desenvolvimento de aços, essa ferramenta se torna extremamente útil para reduzir o volume de experimentos no projeto dessa nova geração de ligas. Assim, os cálculos termodinâmicos com base no banco de dados TCFE7 permitiram a compreensão dos efeitos dos elementos sobre as transformações de fase e a previsão das propriedades mecânicas.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CSN por fornecer o material de estudo e pela autorização para a publicação dos resultados experimentais.

## REFERÊNCIAS

- 1 Zuazo I, Hallstedt B, Lindahl B, Selleby M, Soler M, Etienne A, Perlade A, Hasenpouth D, Massardier-Jourdan V, Cazottes S, Kleber X. Low-density steels: complex metallurgy for automotive applications. *Jom*. 2014;66(9):1747-1758.
- 2 Rana R, Lahaye C, Ray RK. Overview of lightweight ferrous materials: strategies and promises. *Jom*. 2014 Sep 1;66(9):1734-1746.
- 3 Rana R, Liu C, Ray RK. Low-density low-carbon Fe–Al ferritic steels. *Scripta Materialia*. 2013;68(6):354-359.
- 4 Zuazo I, Brechet Y, Maugis P. Austenite decomposition in Fe-Mn-Al-C alloys. *InEuromat*. 2007;1(2):1245-1253.
- 5 Kim SH, Kim H, Kim NJ. Brittle intermetallic compound makes ultrastrong low-density steel with large ductility. *Nature*. 2015;518(7537):77-9.
- 6 Sutou Y, Kamaiya N, Umino R, Ohnuma I, Ishida K. High-strength Fe-20Mn-Al-C-based alloys with low density. *ISIJ International*. 2010;50(6):893-899.
- 7 Chin KG, Lee HJ, Kwak JH, Kang JY, Lee BJ. Thermodynamic calculation on the stability of (Fe, Mn) <sub>3</sub>AlC carbide in high aluminum steels. *Journal of Alloys and Compounds*. 2010;505(1):217-223.
- 8 TCAB. TCFE9 Database. Stockholm: TCAB; 2017.
- 9 Sundman B, Jansson B, Andersson JO. The Thermo-Calc databank system. *CALPHAD*. 1985;9:153–90
- 10 TCAB. TCFE7 Database. Stockholm: TCAB; 2012.
- 11 Paek MK, Do KH, Kang YB, Park JH, Pak JJ. Inclusion thermodynamics for high-Al high-Mn advanced high strength steels. In *Proceedings of Clean Steel in Future—Prof Hae-Geon Lee Symposium 2012*.
- 12 Huang CF, Ou KL, Chen CS, Wang CH. Research of phase transformation on Fe–8.7 Al–28.3 Mn–1C–5.5 Cr alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. 2009;488(1):246-249.