

# MODELAGEM TERMODINÂMICA APLICADA A OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS E DESENVOLVIMENTO DE NOVAS LIGAS<sup>1</sup>

Alexandre Bellegard Farina<sup>2</sup> José Britti Bacalhau<sup>3</sup> Roberto Tiburcio Canito Frota Junior<sup>4</sup> Eduardo Netto de Souza<sup>5</sup> Mario Cesar Mantovaní<sup>6</sup> Alexandre Sokolowski<sup>7</sup> Celso Antonio Barbosa<sup>8</sup>

#### Resumo

Neste trabalho são apresentados exemplos do uso da ferramenta de modelagem termodinâmica aplicada ao desenvolvimento de novas ligas para diferentes segmentos e aplicações. Através do emprego da modelagem termodinâmica acoplada a simulações numéricas de transporte de calor e simulações mecânicas, foi possível otimizar rotas de laminação e tratamento térmico de forma a se obter a melhoria de propriedades de aços e ligas especiais. O uso da ferramenta de modelagem termodinâmica também é de fundamental importância para o desenvolvimento de novas ligas as quais já consideram deste o início da modelagem variáveis que processo, simplificando o desenvolvimento tanto na escala piloto como industrial.

**Palavras-chave**: Modelagem numérica; Simulações termodinâmicas; Aços especiais; Ligas especiais.

#### THERMODYNAMIC MODELLING APPLIED TO THE OPTIMIZATION AND DEVELOPMENT OF NEW ALLOYS

#### Abstract

In this work there are presented some applications examples of the use of thermodynamic modeling to development of new alloys for different segments and applications. By the use of thermodynamic modeling coupled with numerical simulations of heat transport and mechanical simulations, it was possible to optimize the rolling and heat treatment routes in order to improve the properties of specialty steels and alloys. The use of the thermodynamic modeling it is also important to the development of new alloys which consider from its conception the process variables, simplifying the development of the new material in the pilot and industrial scale.

Key words: Numerical modeling; Thermodynamic modeling; Specialty steels; Specialty alloys.

- <sup>1</sup> Contribuição técnica ao 68º Congresso Anual da ABM Internacional, 30 de julho a 2 de agosto de 2013, Belo Horizonte, MG, Brasil.
- <sup>2</sup> Engenheiro metalurgista. MsC. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; alexandre.farina@villaresmetals.com.br.
- <sup>3</sup> Engenheiro de materiais. MsC. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; jose.bacalhau@villaresmetals.com.br.
- <sup>4</sup> Engenheiro mecânico. MsC. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; roberto.frota@villaresmetals.com.br.
- <sup>5</sup> Engenheiro mecânico. Dr. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; eduardo.souza@villaresmetals.com.br.
- <sup>6</sup> Engenheiro metalurgista. Dr. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; mario.mantovani@villaresmetals.com.br.
- <sup>7</sup> Engenheiro mecânico. Dr. membro da ABM. Engenheiro Pesquisador. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; alexandre.sokolowski@villaresmetals.com.br
- <sup>8</sup> Engenheiro metalurgista, membro da ABM. Diretor de Tecnologia e Pesquisa e Desenvolvimento. Villares Metals S.A. Sumaré, SP, Brasil; celso.barbosa@villaresmetals.com.br.



# 1 INTRODUÇÃO

O processo de fabricação de produtos longos de acos e ligas especiais na Villares Metals S/A compreende as etapas de fusão, refusão, forjamento, laminação, tratamentos térmicos e acabamento. Neste processo, a carga metálica é fundida em um forno elétrico de fusão a arco (FEA) ou forno de indução sob vácuo (VIM -Vacuum Induction Furnace), produzindo uma dada composição química próxima a desejada. A composição do aço/liga é corrigida através da adição de elementos de liga e de reações de refino na panela quando elaborado via FEA ou apenas por adições no próprio VIM. Adicionalmente, para aços produzidos no FEA, dependendo do aço/liga, este pode ser processado no conversor VOD( Vacuum Oxygen Decarburizer). Assim que a composição química desejada é atingida, esta é lingotada convencionalmente ou continuamente (apenas FEA) de forma a gerar os lingotes ou tarugos do material. Dependendo da aplicação do material, os lingotes podem ser refundidos via refusão sob vácuo (VAR - Vacuum Arc Remelting) ou por refusão por eletro-escória (ESR - Electroslag Remelting) de forma a possibilitar uma limpeza adicional associada a um refino da microestrutura bruta de fusão. Os lingotes podem ser então forjados e/ou laminados para gerar o produto final. Tanto no forjamento quanto na laminação os lingotes são homogeneizados por um tempo e temperatura dependentes de cada material. As variáveis de processo são determinadas em acordo com a metalurgia de cada liga, sendo função da composição química, da plasticidade a quente, da difusividade dos elementos passíveis de segregação e das cargas de trabalho necessárias para cada operação. Ao final do processo, de acordo com as necessidades de cada produto, as barras ou tarugos são tratados termicamente, acabados, inspecionados e liberados para entrega aos clientes.

Durante o ciclo de processamento acima descrito, inúmeras variáveis metalúrgicas necessitam ser definidas, tais como os intervalos de composição, as temperaturas de fusão, temperaturas de forjamento e laminação, ciclos de tratamentos térmicos, taxas de deformação entre muitas outras. Destes parâmetros de processos, especialmente aqueles que estão correlacionados com tempo e temperatura são de fundamental importância, visto que eles respondem diretamente pela qualidade do produto final e em geral a composição química é normatizada.

Uma das formas de se realizar previsão destes parâmetros é através das técnicas de simulações numéricas. Através do emprego de softwares dedicados e utilizando-se de modelos computacionais baseados na termodinâmica, transporte de calor e massa além de balanços mecânicos, é possível determinar com razoável precisão os intervalos para estes parâmetros de processo.

A aplicação das ferramentas computacionais para previsão e otimização dos parâmetros de processo tem sido intensificada na última década devido à maior disponibilidade de softwares e maior acessibilidade à tecnologia. Devido a constante melhoria dos processadores e consequente redução do tempo de resposta das simulações, os modelos computacionais têm sido cada vez mais aprimorados e, atualmente, já consideram um grande número de variáveis físicas nas simulações, tornando as simulações cada vez mais realistas quando comparadas aos resultados obtidos em laboratório e em escala industrial.

No passado através de equações empíricas, ajustadas matematicamente para previsão de determinados fenômenos em certas famílias de aços e ligas, era feita a previsão de parâmetros de processo. No segmento da laminação, por exemplo, as famosas equações de Ekelund são um típico exemplo destes ajustes



matemáticos.<sup>(1)</sup> Atualmente, através de programas baseados na modelagem através do método dos elementos finitos, como o DEFORM3D<sup>®</sup> e o Abaqus<sup>®</sup>, os modelos de previsão passam a considerar o sistema de forma mais ampla, baseando-se não mais em equações empíricas, mais nas leis da Mecânica e nas propriedades físicas dos aços e ligas. Exemplos destas propriedades relacionam-se com o comportamento das ligas em altas temperaturas (curvas tensão x deformação), mapas de processamento, coeficientes de transferência de calor, entre outras importantes propriedades.

Assim como nas simulações de sistemas termomecânicos, a simulação dos equilíbrios termodinâmicos tem se mostrado uma importante área de conhecimento para a determinação dos parâmetros de processo. O emprego da termodinâmica computacional tem se tornado mais acessível com os softwares atualmente em comercialização, como o Thermo-Calc<sup>®</sup>, o Pandat, o MTDATA<sup>®</sup> e o FactSage<sup>®</sup>, entre outros. Estes programas têm considerado cada vez mais os modelos físicos envolvidos de forma que as previsões têm se tornado cada vez mais realistas e precisas. Dados termodinâmicos e bancos de dados termoquímicos mais precisos têm sido desenvolvidos, propiciando uma maior aproximação dos resultados experimentais dos resultados das simulações.

Neste sentido, este trabalho visa apresentar através de quatro exemplos a implementação destas ferramentas em conjunto para o desenvolvimento de novas ligas e melhoria de processos na atividade de Pesquisa e Desenvolvimento da Villares Metals S.A., empresa reconhecida em 2008 com o APDIC Award - Alloy Phase Diagram International Commission, prêmio conferido às empresas que se destacaram na aplicação de diagramas de fases e termodinâmica na pesquisa.<sup>(2)</sup>

#### 2 EXEMPLO 1 – DESENVOLVIMENTO DA LIGA VAT 32<sup>®</sup>

As tradicionais ligas à base de Ni UNS N07751 e UNS N07080 são comumente utilizadas na fabricação de válvulas automotivas para motores de combustão interna de alto desempenho. Estas ligas apresentam elevada resistência à quente, à oxidação, corrosão, fluência e estabilidade microestrutural, no entanto, estas ligas apresentam baixa resistência ao desgaste abrasivo e elevado custo, devido aos altos teores de Ni.<sup>(3)</sup>

Como forma de possibilitar uma alternativa com menor custo e propriedades similares as tradicionais ligas de Ni, foram desenvolvidas as ligas VAT 32<sup>®</sup> e VAT 36<sup>®</sup> para aplicação em válvulas de motores de combustão interna.

As ligas VAT 32<sup>®</sup> e VAT 36<sup>®</sup> foram desenvolvidas partindo-se da conceituação da aplicação, isto é, na aplicação em válvulas automotivas para motores de combustão interna o material deve apresentar uma elevada resistência mecânica e à fluência em conjunto com elevada resistência à corrosão e a oxidação. Estas propriedades devem ocorrer simultaneamente com a necessária resistência à fadiga à quente e ao desgaste, as quais devem permitir a aplicação nas mesmas condições das ligas UNS N07080 e UNS N07751. Uma restrição adicional refere-se a necessidade de garantir a estabilidade microestrutural, proporcionando pouco ou nenhum crescimento de grão e precipitação de fases deletérias nas condições da aplicação.

A aplicação em válvulas automotivas para motores de combustão interna de alto desempenho compreende aplicações em temperaturas da ordem de 700-800°C com cargas de combustão da ordem de 220 Bar. Os assentos de válvula em geral



apresentam elevada dureza a quente (~35HRC a 700°C) e são os principais responsáveis pelo desgaste da região do assento das válvulas.

Com base nestes conceitos, a liga deve apresentar uma matriz com elevada resistência à corrosão, a qual, em geral, está associada com um teor de cromo superior a 14-16%. De forma a prover a resistência mecânica a quente, as fases intermetálicas do sistema Ni-Nb-Al-Ti tornam-se excelentes opções devido ao comportamento anômalo do limite de escoamento com a temperatura, garantindo a resistência mecânica a quente. A resistência ao desgaste é assegurada através da combinação da resistência ao desgaste da matriz com a resistência ao desgaste promovida pelos precipitados. A matriz da liga deve então apresentar uma boa resistência ao desgaste, a qual pode ser obtida através de uma matriz com precipitação de fases intermetálicas combinada com dispersões de carbonetos de forma a prover a resistência ao desgaste adicional.

Considerando a necessidade da resistência a corrosão, escolhe-se teores da ordem de 16% de cromo. Estes teores de cromo, no entanto, promovem a precipitação de  $M_{23}C_6$  na presença de carbono, necessário para assegurar a presença de carbonetos para assegurar a resistência ao desgaste. Assim, o carbono da liga deve ser estabilizado para evitar a precipitação destes carbonetos do tipo  $M_{23}C_6$  e a consequente perda da resistência à corrosão local. Os elementos clássicos para estabilização são o titânio e o nióbio, produzindo TiC ou NbC. Como estes carbonetos ajudam na resistência ao desgaste, eles, portanto, são de grande interesse. Teores da ordem de 0,25% em volume de carbonetos primários têm se mostrado suficientes para assegurar uma boa resistência ao desgaste.

A adição de alumínio, titânio e nióbio são importantes para produção de fases intermetálicas que aumentam a resistência à quente da liga através da precipitação das fases  $\gamma'$  (Ni<sub>3</sub>(Al,Ti)) e  $\gamma''$  (Ni<sub>3</sub>Nb). Observa-se que quando as somas dos teores de alumínio e titânio são superiores a 4,0%, ocorre uma drástica redução da plasticidade a quente da liga, dificultando-se ou mesmo inviabilizando operações de conformação, as quais são essenciais para a fabricação das válvulas. Assim, a soma destes teores deve ser inferior a 4,0%. Adicionalmente, a precipitação das fases  $\gamma'$  e  $\gamma''$  deve ocorrer nos tratamentos térmicos de envelhecimento, isto é, elas não devem se formar durante a solidificação da liga.

Uma matriz rica em níquel apresenta a desvantagem do elevado custo. Como este desenvolvimento necessita de uma redução de custo em relação às tradicionais ligas de Ni, a redução do teor de níquel em prol da substituição do níquel pelo ferro é uma das necessidades para redução de custo nas novas ligas.

As simulações termodinâmicas têm, portanto, a finalidade de auxiliar na resposta de algumas variáveis, sejam elas: os teores de alumínio, titânio, nióbio, carbono, níquel e ferro. Neste caso foi utilizado o programa Thermo-Calc<sup>®</sup> associado ao banco de dados TTNI8.

Considerando que o principal tratamento térmico é o de envelhecimento que usualmente é realizado entre 700°C e 800°C, os cálculos devem ser feitos com referência nestas temperaturas. Na Figura 1 observa-se na isoterma de 800°C do diagrama C-16%Cr-Fe-Ni, que para teores entre 30 a 60% de Fe e teores de carbono entre 0,10% e 0,30% há um domínio bifásico composto por carbonetos do tipo  $M_{23}C_6$  e pela fase austenita. Neste diagrama, verifica-se a possibilidade de uma liga contendo entre 30 e 50% de Ni, onde 30% traria a melhor redução do teor de Ni em relação às tradicionais ligas de Ni desta aplicação.



Figura 1: Isoterma de 800°C para o sistema C-16%Cr-Fe-Ni.

Considerando o teor de Ni fixo em 30%, e assumindo a adição de carbono da ordem de 0,30%, de forma a assegurar a dispersão de partículas primárias, pode-se calcular as isotermas de 700°C e 800°C para o sistema Fe-30%Ni-16%Cr-Ti-Al considerando os teores de Al e de Ti entre 0 e 4,0%. Estas isotermas são apresentadas nas Figuras 2(a) e 2(b). Nestas isotermas observa-se que devido a não estabilização do carbono por outro elemento, ele é estabilizado pelo Ti, gerando a presença de carbonetos de Ti na liga causando uma redução do domínio de estabilidade da fase  $\gamma$ '.



Figura 2: Isotermas de (a) 700°C e (b) 800°C do sistema Fe-30%Ni-16%Cr-Ti-Al.

Assumindo a adição de Ti e de Al da ordem de 2,0% cada, e mantendo a composição química prévia, obtém-se o sistema Fe-30%Ni-16%Cr-2%Ti-2%Al-Nb, sendo o Nb a variável a ser avaliada. Na **Figura 3** é apresentada a isopleta do sistema Fe-30%Ni-16%Cr-2%Ti-2%Al-Nb para o Nb com balanço no teor de Fe.





Figura 3: Isopleta do sistema Fe-30%Ni-16%Cr-2%Ti-2%Al-Nb para o Nb com balanço no teor de Fe.

Na isopleta da Figura 3, observa-se que para teores maiores que 2,0% de Nb, as ligas passam a ser hipereutéticas, com precipitação primária de NbC. Para teores maiores que 4,5% a liga é totalmente estabilizada pelo Nb não ocorrendo mais formação de carboneto do tipo M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>. Observa-se que a simulação prevê a formação em equilíbrio das fases de Laves e Sigma em temperaturas inferiores a 1200°C e 700°C respectivamente. No entanto é sabida a cinética lenta de precipitação destas fases quando os principais elementos para sua formação já se encontram estabilizados em outras fases com cinética lenta de dissolução.

Da isopleta da Figura 3, uma das composições que se mostrou promissora é a Fe-30%Ni-16%Cr-2%Ti-2%Al-4%Nb, de forma que o carboneto  $M_{23}C_6$  já está praticamente estabilizado e a cinética de precipitação das fases de Laves e Sigma é lenta, considerando que o Nb está estabilizado na forma das fases  $\gamma$ " (*fase não presente no cálculo devido a sua inexistência no banco de dados utilizado – presença verificada por difração de raios-X*) e NbC. O mapa de fases desta composição é apresentado na Figura 4(a). Através de inúmeros ciclos iterativos para ajuste da composição, obtém-se o mapa de fases da Figura 4(b) que representa o mapa de fases da liga VAT 32<sup>®</sup> em estado de equilíbrio.



**Figura 4:** Mapas de fases da liga VAT 32<sup>®</sup> em sua composição inicial (a), obtida através da isopleta da Figura 3 e composição química final (b), obtida através de inúmeras iterações para ajustes da composição química de base (a).



Através do emprego da modelagem termodinâmica, a quantidade de ligas avaliadas na escala piloto foi extremamente reduzida além de possibilitar um desenvolvimento mais rápido e eficiente para obtenção do novo produto.

## 3 EXEMPLO 2 – OTIMIZAÇÃO DO TRATAMENTO TÉRMICO DO AÇO N4501

Nos aços inoxidáveis superduplex, uma das principais dificuldades de processamento reside na obtenção do correto balanceamento das fases austenita e ferrita de forma a assegurar a resistência à corrosão desejada.<sup>(4)</sup>

Do ponto de vista das normas NORSOK, NACE e ASTM, o controle da resistência à corrosão é realizado através do simples atendimento do PREN da liga em conjunto com resultados positivos para o ensaio de corrosão segundo a norma ASTM G48. O PREN da liga é usualmente calculado através da composição química da liga, de forma que o PREN baseia-se exclusivamente na composição química global da liga e, invariavelmente, está sujeito a condições de segregação devido à partição das fases quanto de amostragem e desconsidera as principais variáveis de processo que acarretam em sensíveis variações na resistência à corrosão da liga, como o tempo e temperatura de tratamento termomecânico.

No caso do aço UNS S32760, a composição química normatizada e uma composição química real são apresentadas na Tabela 1.

Elemento / Liga	UNS S32760	N4501 (c.7441)
C	Máx. 0,03	0,024
Si	Máx. 1,00	0,35
Mn	Máx. 1,00	0,60
Cr	24,0 ~ 26,0	25,30
Ni	6,0 ~ 8,0	6,48
Мо	3,0 ~ 4,0	3,55
Ν	0,20 ~ 0,30	0,25
Р	Máx. 0,030	0,017
S	Máx. 0,010	0,001
Cu	0,50 ~ 1,00	0,54
W	0,50 ~ 1,00	0,63
Fe	Balanço	Balanço
PREN	> 40,0	41,2

 Tabela 1: Composição Química do Aço N4501

Na Figura 5 é apresentado o mapa de fases deste aço considerando duas condições, equilíbrio global com fases deletérias (a) e equilíbrio metaestável sem fases deletérias.





Figura 5: Mapas de fases do aço N4501 em duas condições de cálculo: (a) equilíbrio global com fases deletérias e (b) equilíbrio metaestável sem fases deletérias.

Partindo-se dos dados calculados do diagrama da Figura 5(b), podem ser extraídas as composições químicas e balanços de fases da austenita e da ferrita e o PREN de cada fase pode ser calculado. Assume-se que o PREN do aço seja uma média ponderada dos PREN das fases austenita e ferrita em função das respectivas frações mássicas de fases. Na Figura 6 é apresentado o PREN do aço N4501. Neste diagrama observa-se que tratamentos térmicos abaixo de 1050°C acarretam em um PREN do aço inferior a 40, mesmo que a composição química apresente PREN superior a 41.



**Figura 6:** PREN das fases austenita e ferrita e do aço em função da temperatura de tratamento térmico a qual o aço é submetido. ( PREN = %Cr + 3.3\*(%Mo + 0.50\*%W) + 16\*%N )

Através da aplicação dos resultados deste cálculo, as temperaturas das rotas de tratamento térmico foram replanejadas, de forma que foi verificado um substancial ganho de qualidade nos produtos através do emprego deste tipo de simulação.

# 4 EXEMPLO 3 – OTIMIZAÇÃO DO FORJAMENTO DO AÇO VH13

Visando-se uma maior produtividade na fabricação de peças forjadas procurase sempre empregar lingotes de maiores dimensões. Através de lingotes maiores, possibilita-se um maior grau de redução, quebrando com maior eficiência a estrutura bruta de fusão e permitindo uma maior homogeneidade das propriedades no produto



68<sup>th</sup> abm international annual congress

final. No entanto, as restrições no desenvolvimento de um projeto para implementação de lingotes maiores na produção recai, em geral, na capacidade da prensa bem como nas inerentes limitações de processo devido à metalurgia do produto. A limitação da capacidade da prensa restringe os parâmetros de processamento, os quais são inerentemente relacionados com a metalurgia do produto, tornando estes parâmetros inevitavelmente inter-relacionados.<sup>(5)</sup>

Os aços especiais e de alta liga geralmente apresentam uma complexa metalurgia. Durante a solidificação destes aços, devido à grande quantidade de soluto, à limitada solubilidade da matriz e à precipitação de fases durante a solidificação, apresentam elevados níveis de microssegregação, sendo este parâmetro fortemente dependente das condições de solidificação. Entre os aços ferramenta, o aço VH13 (AISI H13) é considerado um dos que tem melhor forjabilidade, devido aos menores teores de carbono e elementos de liga em relação às séries D e M, de modo que apresenta uma metalurgia menos complexa. Apesar disso, sua produção requer que os parâmetros de processamento sejam finamente ajustados para que o produto final atenda aos critérios que asseguram a elevada qualidade dos produtos da Villares Metals.

Os parâmetros relativos à temperatura no processamento termomecânico tornam-se mais complexos em função da geração de energia interna de calor devido ao trabalho de deformação. Quanto maior a resistência mecânica de um aço, maior é a geração de calor de deformação. Grosseiramente, a energia gerada na deformação de uma liga é proporcional a integral da curva tensão deformação na temperatura de deformação. Quando um material é conformado, a maior parte da energia de deformação é transformada em calor adiabático. O aumento da temperatura do material devido à geração de calor adiabático deve ser considerado na deformação a quente e no roteiramento do processo, pois esta variável atua sobre os mecanismos de amaciamento e endurecimento e influencia na difusão. Neste sentido, as ferramentas computacionais de simulação numérica dos processos de forjamento, juntamente com as ferramentas de termodinâmica computacional, tornam-se fundamentais para a compreensão dos fenômenos físicos metalúrgicos durante o processo de forjamento.

Durante o forjamento de um lingote, a prensa aumenta sua força em função da reação oferecida pelo material. Neste momento, os mecanismos de resistência vencem os mecanismos de amaciamento e o material começa a ser encruado. Os mecanismos de amaciamento são função da temperatura, velocidade de deformação da prensa e ao grau de deformação imposto. Estas variáveis têm um papel fundamental, ativando, inibindo ou mesmo acelerando os processos de amaciamento, os quais são fortemente dependentes da difusão atômica. No processo de amaciamento, simultaneamente competem os mecanismos de recuperação, recristalização, transformações de fases e crescimento de grão. A somatória destes mecanismos permite ou inviabiliza a conformação do material.

Partindo-se das variáveis de processo de forjamento, obtidos através do sistema de aquisição de dados da prensa hidráulica de 50 MN, como força e velocidade de conformação de lingotes de grandes dimensões (acima de 5 t) do aço VH13, foram simuladas os perfis de deformação e de temperatura no lingote, assumindo-se que a temperatura inicial do lingote é homogênea em 1260°C. Estes perfis são apresentados na Figura 7. Nestes perfis, observa-se que a deformação concentra-se no núcleo do lingote bem como ocorre um aumento de temperatura no núcleo do lingote devido à geração de calor adiabático.



68th abm international annual congress



**Figura 7:** Simulação numérica com o programa DEFORM3D<sup>®</sup> calculado para o forjamento de um lingote de 18t do aço VH13 assumindo-se uma temperatura inicial homogênea de 1260°C. (a) Perfil de deformação e (b) perfil de temperatura.

Considerando que a região mais segregada do lingote concentra-se no núcleo do lingote e que este sofre o maior aumento de temperatura devido à geração de calor adiabático, torna-se necessária a avaliação do perfil de solidificação da liga de forma a evitar que ocorra durante o forjamento a liguação destas regiões. Partindose da composição do aço VH13 (Fe-0,40%C-1,00%Si-0,35%Mn-5,20%Cr-1,50%mo-0,90%V), foram calculados, com auxílio do programa Thermo-Calc<sup>®</sup> associado ao banco de dados TCFE6<sup>®</sup>, o mapa de fases de equilíbrio e a curva de solidificação utilizando-se o modelo de Scheil-Gulliver (Figura 8). Os diagramas da Figura 8 representam os limites teóricos, sendo que a condição real do lingote após a solidificação é intermediária entre estes dois diagramas. No final da solidificação, na região microsegregada, espera-se a ocorrência de células eutéticas de carbonetos M<sub>7</sub>C<sub>3</sub> e M<sub>2</sub>C as quais reduzem a plasticidade do material, bem como apresentam menores temperaturas de fusão, além da precipitação de compostos contendo enxofre. A presença destes microconstituintes faz com que haja uma limitação da temperatura máxima de forjamento do material, ao menos que ocorra a homogeneização e quebra da estrutura bruta de solidificação.



**Figura 8:** Simulação termodinâmica do aço VH13. (a) Mapa de fases em equilíbrio e (b) curva de solidificação calculada com modelo de Scheil-Gulliver.

Correlacionando-se a temperatura de forjamento, com o perfil de temperaturas calculado através da simulação numérica com o programa DEFORM3D<sup>®</sup> e simulação termodinâmica realizada com o programa Thermo-Calc<sup>®</sup>



foi possível ajustar os parâmetros de processo que apresentavam elevado risco de ocorrência de liquação, de forma que, durante o forjamento do material, mesmo as regiões microsegregadas, permaneçam no estado sólido.

### 5 CONCLUSÃO

A utilização da modelagem termodinâmica como ferramenta para o desenvolvimento de novas ligas e otimização de processos apresenta incontáveis vantagens e possibilita uma visão extremamente sistêmica dos processos industriais.

Quando integradas as técnicas de simulação numérica de processos termomecânicos utilizando-se, por exemplo, programas baseados no método dos elementos finitos como o DEFORM3D<sup>®</sup> integrados com a modelagem termodinâmica com o programa Thermo-Calc<sup>®</sup>, uma poderosa sinergia é verificada permitindo a otimização de processos visando à garantia e melhoria da qualidade do produto final.

## REFERÊNCIAS

- 1 Plaut, R. L. Laminação dos aços: tópicos avançados. São Paulo: ABM, 1984. v. 160p
- 2 APDIC Award. http://www.abmbrasil.com.br/news/noticia\_integra.asp?cd=2704. Acesso em 31/03/2013.
- 3 Farina, A. B.; Liberto, R. C. N.; Barbosa, C. A. "Desenvolvimento de novos aços válvula para aplicação em motores de alta performance". In: 67º Congresso ABM Internacional, 31 de julho a 3 de agosto de 2012, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- 4 Barbosa, C. A.; Sokolowski, A. "Development of UNS S 32760 superduplex stainless steel produced inlarge diameter rolled bars. In: BRAZILIAN STAINLESS STEEL CONFERENCE, 10. 2010, Rio de Janeiro. Anais..., Rio de Janeiro: Núcleo Inox, p. 44-58, 2010.
- 5 Pinedo, C.E.; Barbosa, C.A. "Hot work tool steels presenting high toughness and isotropy. Metalurgia e Materiais ABM vol. 51 nº447 pp 960-966 Nov 1995.