

MODELAMENTO MATEMÁTICO DO TRATAMENTO TÉRMICO DE DESCARBONETAÇÃO DE AÇOS ELÉTRICOS¹⁾

*José Adilson de Castro²⁾
Marcos Flávio de Campos²⁾*

Resumo

Aços semi-processados tem recebido especial atenção nos últimos anos devido a sua vasta aplicação para fins elétricos. Objetivando eliminar o fenômeno de envelhecimento, estes materiais são tratados termicamente em uma atmosfera contendo $N_2-H_2-H_2O$. Neste trabalho o modelamento matemático do processo de descarbonetação objetivando a previsão de parâmetros tecnológicos importantes é apresentado. O modelamento matemático do processo de descarbonetação foi formulado baseado na equação de transporte de carbono no interior da chapa acoplada às reações químicas que ocorrem na superfície da mesma. Os fenômenos de formação de óxidos na superfície foi considerado, adicionalmente à difusão do carbono e cinética de reações de descarbonetação. Para a simulação do processo foi elaborado um programa em Fortran 90/95 baseado no método de volumes finitos. Resultados de simulação foram comparados com os resultados experimentais para diversas atmosferas e condições de tratamento. Para todos os casos o modelo concorda com os valores experimentais. Resultados utilizando atmosferas apenas com $N_2-H_2-H_2O$ mostraram ser mais adequadas para tratamento de aços de baixo carbono (abaixo de 50 ppm), pois promovem a remoção do carbono rapidamente com menor oxidação superficial quando o ponto de orvalho da atmosfera é adequadamente controlado. Resultados de simulação mostraram que em atmosferas controladas pode ser atingido até 5 ppm C em aproximadamente 1,5 h.

Palavras-chave: Descarbonetação, Aços semi-processados, Modelamento matemático.

1) Trabalho a ser apresentado no 60th Congresso Anual da ABM – Belo Horizonte – MG – 19 a 22 de Julho de 2004

2) Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ adilson@metal.eeimvr.uff.br www.eeimvr.uff.br

1 INTRODUÇÃO

Máquinas rotativas tais como motores elétricos utilizam aços ao silício idealmente isotrópicos^{1,2} que são comercialmente chamados aços elétricos de grão não orientados sendo classificados em duas categorias principais³⁻⁵. Aqueles totalmente processados e os semi-processados. No processamento industrial, um primeiro estágio consiste no condicionamento das chapas de aço e montagem do estator dos motores. Após a montagem do estator, este é submetido a um tratamento térmico para eliminação de deformação plástica e alívio de tensões⁵⁻⁷. O recozimento final tem ainda os seguintes objetivos⁷: 1) obtenção do tamanho de grão ótimo; 2) descarbonetação e 3) obter a camada de óxido isolante entre as chapas. O objetivo do presente trabalho consiste no modelamento do processo de descarbonetação, que é fundamental para a prevenção do envelhecimento magnético. Durante a vida útil dos aços elétricos alterações microestruturais podem ocorrer tais como precipitação de carbono ou nitrogênio formando carbeto ou nitreto que aumentam as perdas das propriedades magnéticas^{3,8-12}. Em geral, para amenizar tais fenômenos alumínio são adicionados ao aço formando AlN que evitará a formação de nitretos de ferro e evitará o envelhecimento^{9,10}. Embora alguns autores indiquem

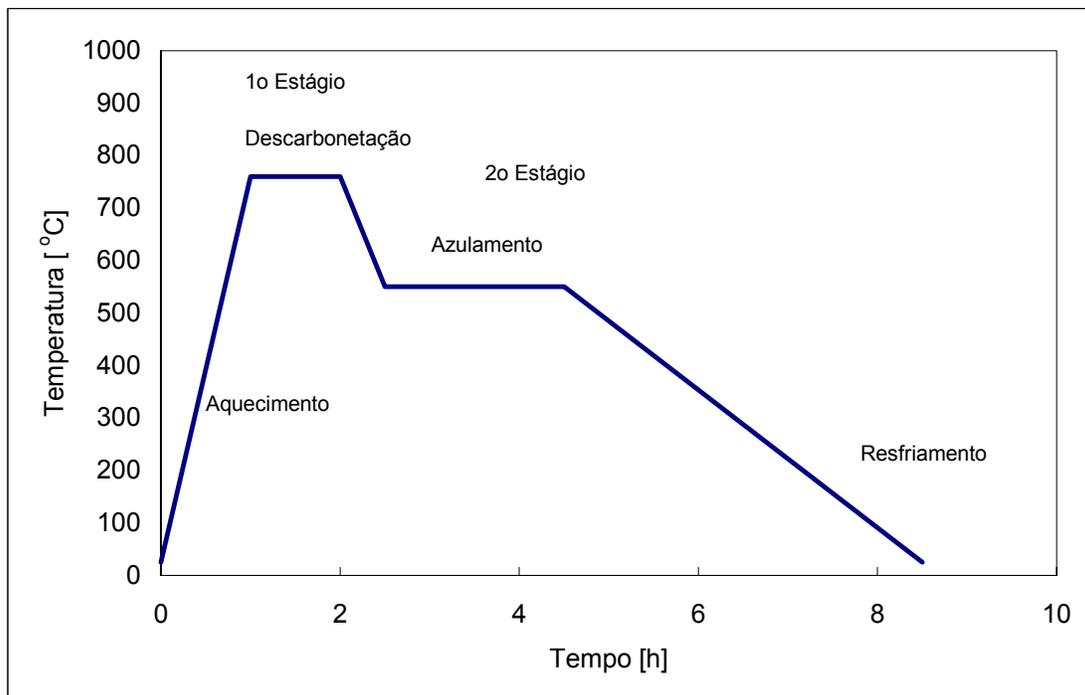


Figura 1. Esquema de um tratamento térmico de descarbonetação para aços elétricos

que o conteúdo em carbono deve ser menor que 30 ppm^{3,8}, envelhecimento magnético tem sido observado para carbono menor que 10 ppm¹³. Porém quando o carbono é reduzido para menor que 50 ppm um outro complicador aparece que é a oxidação sub-superficial¹⁴⁻¹⁸, que é uma questão de grande interesse tecnológico. Portanto, torna-se de grande interesse do ponto de vista tecnológico a determinação do tempo necessário à obtenção de carbono menor que 0,003%, considerado satisfatório para aplicações magnéticas, sem que o material fique exposto à oxidação prolongada³. Esta determinação do tempo ótimo de tratamento possibilita a obtenção de materiais de auto desenpenho. Neste contexto, a simulação

computacional surge como uma ferramenta de grande interesse, pois possibilita a simulação de tratamentos completos de forma virtual de forma rápida fornecendo informações imprescindíveis para a determinação dos parâmetros de tratamento tais como: atmosfera, temperatura e tempo total de tratamento. A Figura 1 mostra um exemplo de tratamento térmico com o 1º e o 2º estágio¹. Até recentemente^{14,17,18}, um típico tratamento em escala industrial consistia em uma atmosfera composta de vapor de H₂O e N₂ e uma pequena quantidade de H₂ mas também CO e CO₂. Para evitar o fenômeno de oxidação sub-superficial atualmente recomenda-se atmosfera com apenas N₂, H₂ e H₂O^{18,19}. Um dos parâmetros mais importantes do tratamento de descarbonetação é a relação PH_2O/PH_2 que é uma função do ponto de orvalho. Um procedimento industrial típico para evitar a formação de FeO é utilizando a temperatura de 760oC e um valor da relação $PH_2O/PH_2=0,35$ o que garante que a descarbonetação ocorre na região do Fe, conforme mostrado na figura 2. Em um segundo estágio(ilustrado

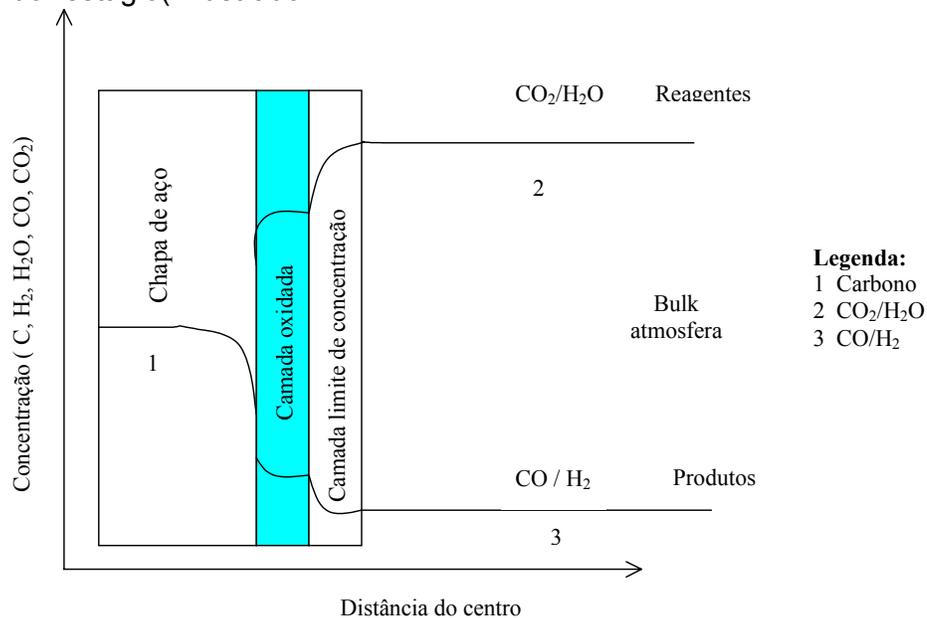
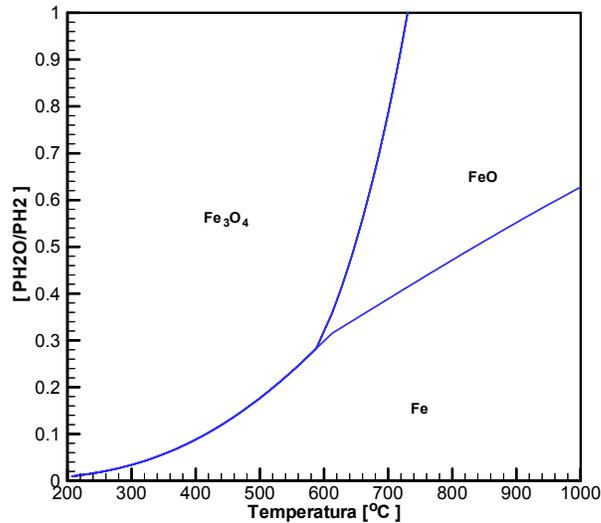


Figura 3. Diagrama mostrando os fatores que controlam a cinética de descarbonetação

na Figura 1) um tratamento de azulamento é realizado na temperatura de 550oC empregando uma alta relação H₂O/H₂ objetivando a formação de Fe₃O₄ ao invés de FeO que não promove bom isolamento magnético. Um outro aspecto também deve

ser focado com relação á formação de outros oxidos tais como fayalita(Fe_2SiO_4), tridimita(SiO_2) ou hercinita ($FeAl_2O_4$) alé dos já previstos pelo diagrama Fe-O-H²⁰⁻²³. A composição exata dos oxidos formados será função da composição química do aço²³⁻²⁴. Neste trabalho será focado o primeiro estágio do tratamento onde a descarbonetação ocorre. O diagrama Fe-O-H é uma ferramenta essencial para a escolha das condições de descarbonetação, entretanto as características particulares do material e a forma de disposição para o tratamento levam a uma condição fora do equilíbrio que dificulta o modelamento apenas baseado no diagrama de equilíbrio. De acordo com Stephenson¹⁴) existem 3 possíveis fatores controlando a cinética de descarbonetação. 1) transporte de reagentes e produtos na fase gasosa; 2) a reação química na interface gas-aço e 3) a difusão do carbono no interior do material. Uma visão esquemática destes mecanismos é apresentada na figura 3. Cálculos indicam que se a difusão fosse a etapa controladora carbono menor que 30 ppm poderiam ser obtidos em tempos menores que 5 min^{14,19}, o que não é observado na pratica, portanto este não deve ser o mecanismo controlador. O espaçamento entre as chapas é muito pequeno(< 6 μ m de acordo com Standaert et al²⁵), então, Stephenson conclui que a etapa controladora é a penetração do gás entre as chapas dos estatores. A composição do gas proximo da superfície da chapa pode ser localmente afetada diminuindo a cinética na interface. Portanto, a cinética de descarbonetação pode ser controlada por 2 diferentes mecanismos: o transporte de reagentes ou produtos ou a camada de óxido formada. Do ponto de vista tecnológico, não é importante qual o mecanismo exato e sim o tempo total de descarbonetação antes que oxidação sub-superficial ocorra¹⁴). Em estudos anteriores^{14,19}) o conhecimento preciso das condições de contorno e experimentais limitaram o tratamento dos principais fenômenos. No presente trabalho, um procedimento numérico baseado no método de volumes finitos é apresentado acoplado a difusão do carbono e a cinética de descarbonetação. A simulação numérica apresenta a vantagem de poder levar em consideração os fenômenos de forma detalhada junto à fina camada onde a reação ocorre e incluir os efeitos da camada oxidada e condições locais de atmosfera.

2 MODELAMENTO

O processo de descarbonetação ocorre combinando a difusão do carbono no interior da chapa de aço e a reação na interface. A modelagem matemática deste processo pode ser representada através da equação de transporte²⁶). para o carbono conforme apresentado na Equação 1^{26,27}).

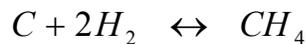
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} \left[D_C^{\text{aço}} \text{grad}(C) \right] - R_C^{\text{superficie}} \quad (1)$$

Na Equação 1 o primeiro termo do lado esquerdo representa a variação local da fração de carbono com o tempo de tratamento, o 1º termo do lado direito representa a difusão do carbono no interior da chapa enquanto o ultimo termo representa a taxa de descarbonetação(cinética). O coeficiente de difusão foi modelado segundo a clássica formulação usando um fator pre-exponencial e a energia de ativação conforme Equação 2a e 2b²⁸).

$$D_C^{\gamma} = (0.07 + 0.06C) \exp \left(-\frac{32000}{1.987T} \right) \quad (2a)$$

$$D_C^\alpha = 0.256 \exp\left(-\frac{24200}{1.987T}\right) \quad (2b)$$

A Equação 1 foi discretizada através do método de volumes finitos^{26,29}. As condições de contorno foram admitidas simétricas. As reações de descarbonetação foram admitidas em uma fina camada superficial onde a camada de óxido é formada. Para a simulação foi usada uma malha de 8000 volumes finitos (20x10x80). As equações a seguir foram usadas para definir a região ferrítica e austenítica, Interface $\alpha/\gamma = 0.1295 - 1.099 \times 10^{-4} T$ que definirá se a equação 2^a ou 2b será usada²⁸. As principais reações de descarbonetação são modeladas como reações reversíveis^{21,23,24}



A relevância da Equação 3c pode ser negligenciada para atmosferas típicas de descarbonetação ($P_{H_2O}/P_{H_2} > 0,1$). As taxas de reações para as Equações 3a e 3b depende da atividade do carbono na interface, pressão de vapor de H₂O e espessura da camada de oxido formada. Discussões a respeito dos mecanismos e taxas de tais equações podem ser encontrados na literatura^{23,24}. A Equação 4 representa a cinética da descarbonetação.

$$R_C = \left[k_1 [a_C] P_{H_2O} \left(1 - \exp\left(\frac{\Delta G_1}{RT}\right) \right) + k_2 [a_C] P_{CO_2} \left(1 - \exp\left(\frac{\Delta G_2}{RT}\right) \right) \right] \quad (4)$$

Usando medidas experimentais da concentração de carbono as constantes cinéticas podem ser ajustadas para representar o processo industrial. Um código em Fortran 90/95 foi desenvolvido neste trabalho para simular o processo de descarbonetação de aços elétricos semi-processados. A estruturação do código consiste em 3 módulos principais: 1) Pre-processador onde as informações de parâmetros do processo bem como a geração da malha de volumes finitos; 2) Solver onde as soluções da equação de transporte é obtida com as devidas condições de contorno; 3) Pos-processador- onde os resultado do calculo e visualização dos resultados são obtidos.

3 RESULTADOS / DISCUSSÕES

O modelo assume que inicialmente o carbono está uniformemente dissolvido. A atmosfera é selecionada para cada cálculo e a temperatura da chapa é admitida constante e igual a temperatura do forno. Um dos objetivos do trabalho é comparar a performance de dois procedimentos industriais. O primeiro parte de um aço com alto carbono e utiliza atmosfera com CO/CO₂, enquanto o segundo parte de um aço de baixo carbono e atmosfera contendo H₂/H₂O. As Figuras 4a e 4b mostram os resultados da evolução do perfil de concentração de carbono para as duas práticas industriais analisadas. No caso do aço alto carbono e atmosfera exotérmica a descarburização começa na região austenítica onde a difusão do carbono é lenta. À

medida que a transformação ocorre a austenita se transforma em ferrita. Assim, a região próxima à superfície se transforma em ferrita antes da região central. Devido à presença de austenita um forte gradiente de concentração é desenvolvido na chapa e a presença de austenita permanece até aproximadamente 1,5 h de tratamento. Esta é uma informação importante porque se o tempo de processamento

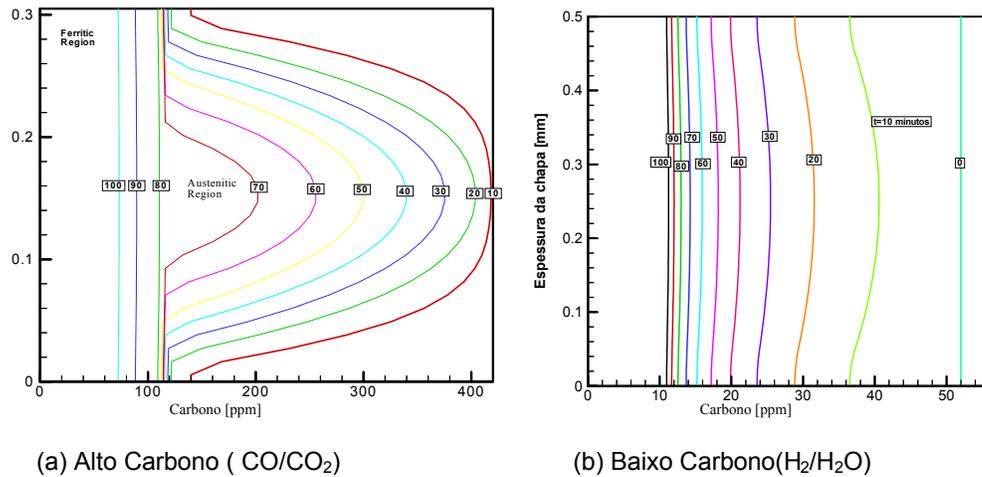


Figura 4. Evolução temporal da composição do carbono ao longo da espessura das chapas para os dois metodos de tratamento.

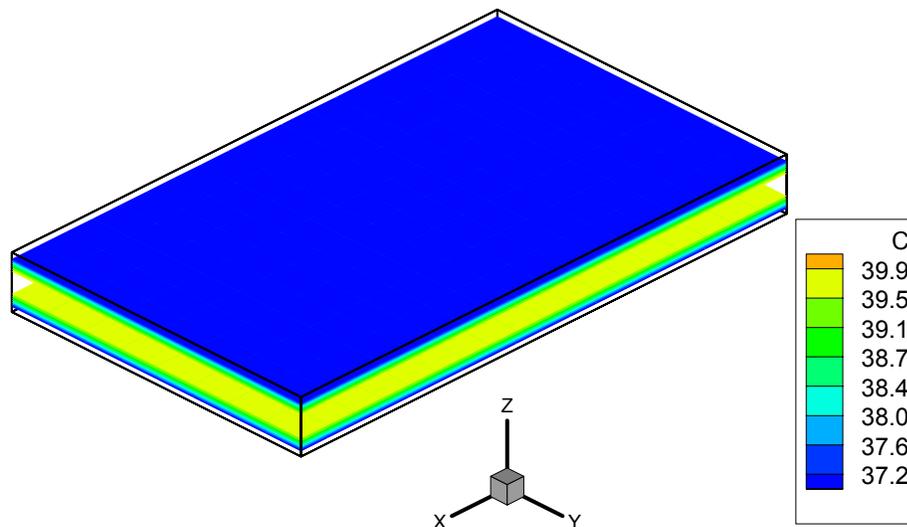


Figura 6. Distribuição de concentração de carbono no interior da chapa após 10 minutos de tratamento para o aço baixo carbono e atmosfera à base de H₂/H₂O.

é longo a oxidação poderá ocorrer. Na Figura 4b os perfis de concentração são apresentados para o caso de aço com baixo carbono e atmosfera à base de hidrogênio. Neste caso todo o tratamento é realizado na região ferrítica e o gradiente

de concentração desenvolvido é praticamente imperceptível sendo possível atingir baixos níveis de carbono com distribuição uniforme logo no início do tratamento.

Figura 5 mostra as iso-superfícies de concentração de carbono no interior da chapa após 10 min de tratamento com atmosfera $N_2-H_2-H_2O$ a $760\text{ }^\circ\text{C}$. Como pode ser observado os gradientes de concentração para este caso são pequenos ($< 3\text{ ppm}$) devido ao processo ocorrer na região ferrítica onde a difusão do carbono é duas vezes maior em ordem de grandeza quando comparado com a região austenítica. As Figuras 5a e 5b apresentam a confrontação dos resultados previstos pelo modelo e medidos experimentalmente para ambos os métodos analisados. Embora as condições de tratamento sejam bastante diferentes o modelo mostrou-se capaz de prever a evolução do tratamento de forma precisa para ambos os casos, o que valida o modelo proposto neste trabalho.

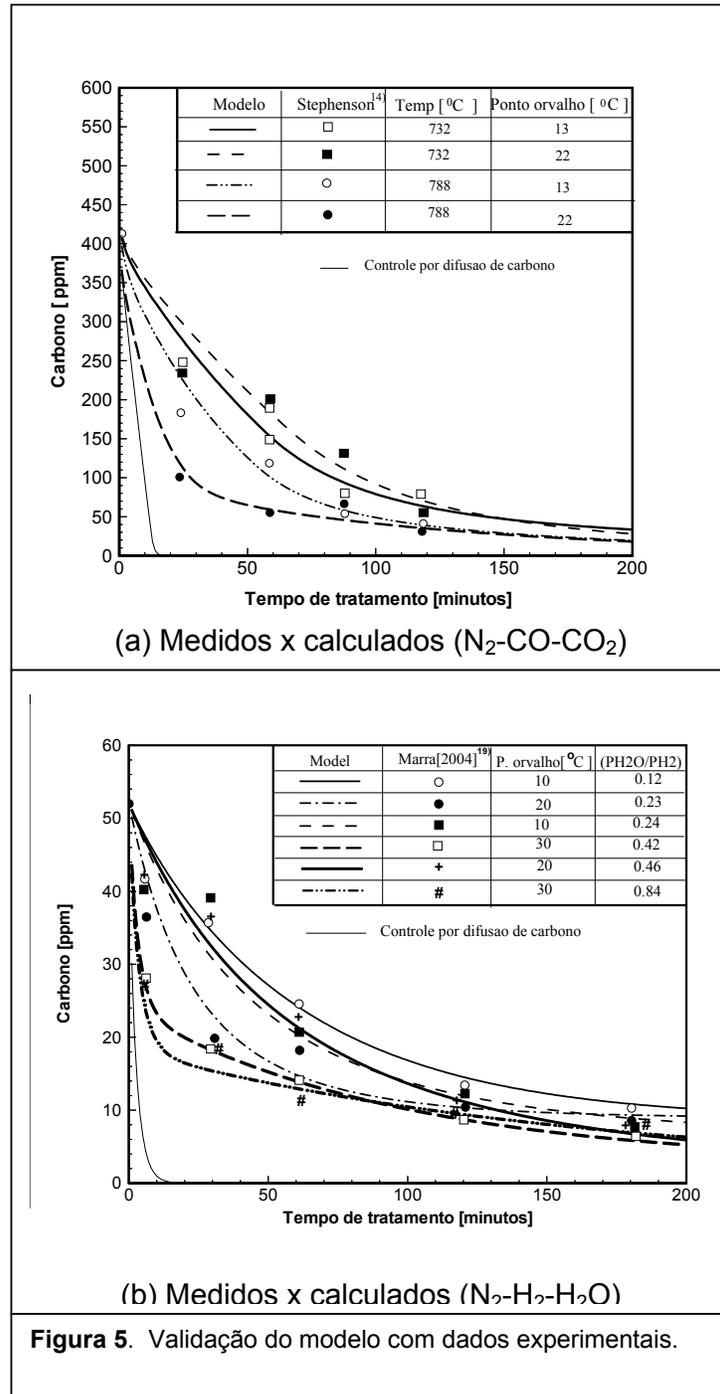


Figura 5. Validação do modelo com dados experimentais.

4 CONCLUSÕES

Um modelo matemático para avaliar o processo de descarbonetação de aços elétricos semi-processados foi desenvolvido. O modelo é baseado no transporte de carbono e cinética de oxidação do mesmo na interface chapa ambiente. O Método de volumes finitos foi utilizado e os resultados de simulação foram confrontados com resultados experimentais do processo de descarbonetação sendo capaz de prever a concentração de carbono durante o tratamento térmico. O modelo foi utilizado para investigar a influência da atmosfera, carbono inicial e espessura da chapa em parâmetros tecnológicos tais como: tempo de tratamento e carbono final. Resultados de simulação indicaram que a etapa de difusão não é a etapa controladora para

todos os casos analisados. A etapa controladora para para o processo de descarbonetação pode ser o transporte dos reagentes e produtos gasosos ou a oxidação sub-superficial. Resultados de simulação indicaram ainda que se a descarbonetação ocorre na região ferrítica a distribuição do carbono residual é uniforme, o que confere propriedades isotrópicas para a chapa. Por outro lado se a descarbonetação ocorre na região austenítica é necessário um tempo de tratamento da ordem de 3 vezes superior e em geral, acompanhado de oxidação sub-superficial e possíveis gradientes de concentração. Os resultados calculados mostraram a importância de um controle preciso da atmosfera do forno visando acelerar a cinética e evitar efeitos deletérios.

5- NOMENCLATURA

a_C : Atividade do carbono	[-]
C_0 : Carbono inicial	[ppm]
C : Concentração de carbono	[ppm]
D_C^{γ} : Coeficiente de difusão do carbono na austenita	[cm ² /s]
D_C^{α} : Coeficiente de difusão do carbono na ferrita	[cm ² /s]
D_C : Coeficiente de difusão do carbono na chapa de aço	[cm ² /s]
$k_1 ; k_2$: Constantes cinéticas	[s ⁻¹]

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq por incentivar e fomentar o desenvolvimento tecnológico nacional. MF de Campos agradece o suporte da CAPES (Programa ProDoc) e CNPq (proc. 504762/2004-4.) JA de Castro agradece ao CNPq (Edital Universal 2003 proc. 477240-03-0)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M.F. de Campos, F.J.G. Landgraf, R. Takanohashi, F.C. Chagas, I.G.S. Falleiros, G.C. Fronzaglia, H. Kahn: *ISIJ Int.*, **44** (2004), 591.
- [2] M.F. de Campos, F.J.G. Landgraf, I.G.S. Falleiros, G.C. Fronzaglia, H. Kahn: *ISIJ Int.*, **44** (2004), 1733.
- [3] F. E. Werner, R. I. Jaffee. *J. Mat. Eng. Perf.* 1 (1992) 227.
- [4] A.J. Moses: *IEE Proc.*, 137 A, n. 5(1990), 233.
- [5] H. Shimanaka ,Y. Ito, K. Matsumura and B. Fukuda: *J. Magn. Magn. Mat.*, 26,(1982),57.
- [6] S. W. Cheong, E. J. Hilinski, A. D. Rollett: *Met. Trans. A*, **34A** (2003)1311.
- [7] M.F. de Campos, J.C. Teixeira, F.J.G. Landgraf: *J. Magn. Magn. Mat*, in press.
- [8] L. J. Dijkstra, C. Wert. *Phys. Rev.* 79 (1950) 979.

- [9] L. J. Dijkstra, in: A. E. Berkowitz; E. Kneller (Editors), Magnetism and Metallurgy. New York, Academic Press, 1969, v. 2, p. 513-522.
- [10] W. C. Leslie, D. W. Stevens. Trans. AIME 57 (1964) 261-283.
- [11] G. M. Michal, J. A. Slane. Met. Trans. A, 17A (1986) 1287.
- [12] G. M. Michal, J. A. Slane. Journal of Metals, **38**, (1986) 32-36.
- [13] K. Eloit, J. Dilewijns, C. Standaert and B. C. De Cooman, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 133 (1994) 223-225.
- [14] E.T. Stephenson: J. Materials Engineering, 12, n.1(1990),69.
- [15] A.L.Geiger: Journal of Applied Physics, 50 (1979),2366.
- [16] J.P.Huffman and E.B. Stanley: Journal of Applied Physics, 50 (1979),2363.
- [17] G. Lyudkovski, A.G.Preban and J.M.Shapiro: Journal of Applied Physics, 53 (1982), 2419.
- [18] R.R.Judd, M.S. Stanescu and D. Baciuc: Heat Treatment of Metals, (1995),83.
- [19] K.M. Marra, E.A. Alvarenga and V.T.L. Bueno: ISIJ Int. 44,(2004),618.
- [20] Hae Geon Lee. Chemical Thermodynamics for Metals and Materials. World Scientific Pub Co Inc. (1999).
- [21] M. Jenko, B. Korousic, D. Mandrino, V. Presern. Vacuum 57 (2000) 295-305.
- [22] D. Mandrino, M. Jenko Vacuum 61 (2001) 157-161.
- [23] W.F. Block, N. Jayaraman. Mater. Sci. Tech. Ser. 2 (1) (1986) 22-27.
- [24] B. Korousic, M. Jenko, M. Stupnisek. Steel Res. 73(2) (2002) 63-68.
- [25] C. Standaert, K. Eloit, A. De Paepe and P.Wokowski: Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 160, (1996),139.
- [26] J. A. Castro, H. Nogami and J. Yagi: ISIJ Int. 41, (2000), 24.
- [27] J.C. Slattery, Advanced Transport Phenomena, Cambridge University Press, (1999)
- [28] A.R. Marder, S.M. Perpetua, J.A.Kowalik and E.T. Stephenson: Metallurgical Transactions A, 16A,(1985), 1160.
- [29] M.C. Melaen: Numerical Heat Transfer, B, 21,(1992),1.

MATHEMATICAL MODELING OF DECARBURIZING PROCESS OF ELECTRICAL STEELS¹⁾

*José Adilson de Castro²⁾
Marcos Flávio de Campos²⁾*

Abstract

Non-oriented semi-processed electrical steels are used for the core of electrical motors. To avoid the magnetic aging phenomena, these materials are usually heat-treated under appropriate atmospheres - (N₂-H₂-H₂O) or (N₂-H₂-H₂O-CO-CO₂) - to carbon removal. The kinetics of the decarburization process is function of the different atmospheres, which also have different dew points. Another important decarburization variable is the initial carbon content . To evaluate the effect of these variables on the decarburization, a model was developed using the finite volume method (FVM). This model allows to study the influence of technological parameters like the furnace atmosphere, treatment time and strip thickness on the final carbon content. The model indicates that the control of the reaction is not by the carbon diffusion, and should be attributed to the chemical reaction in the gas-solid interface or to the transport of products and reactants. If the carbon content is small - in such way the steel is ferritic - the carbon is almost uniformly distributed inside the sheet (small carbon gradient). However, if the carbon is high - and austenite is present – the decarburization process will be slower (and with a strong carbon gradient).

Key-words: Electrical steels; Decarburization; Mathematical modeling; Rate equation; Transport equation; Kinetics

1) Paper to be presented at 60th Annual ABM Congress – Belo Horizonte- July, 19 - 22 (2005)
2) Post graduate program on metallurgical Engineering - EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ adilson@metal.eeimvr.uff.br
www.eeimvr.uff.br