

REDE DE TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL APLICADA AO DESENVOLVIMENTO DE MATERIAIS AVANÇADOS: INCLUSÕES EM AÇOS¹

*Roberto Ribeiro de Avillez.*²

*André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva*³

*Flávio Beneduce Neto*⁴

*Carlos Alberto Mendes Moraes*⁵

Resumo

Uma rede de pesquisa cooperativa nacional foi estabelecida visando oferecer a aplicação da termodinâmica computacional, em seus vários aspectos, ao desenvolvimento de materiais avançados. Em vista do papel estratégico do aço para o País, em especial os aços de maior valor agregado, a rede optou por desenvolver, como primeiro tema pré-competitivo, duas iniciativas ligadas a inclusões não-metálicas em aços, tema que tem sido decisivo na produção eficiente de aços de alto valor agregado. A rede é composta por um grupo de instituições acadêmicas e de pesquisa e indústrias siderúrgica que atenderam a convite, por ocasião da constituição da rede cooperativa. Neste trabalho são apresentados os principais passos na constituição da rede, identificação dos objetivos e um resumo da metodologia de trabalho e dos trabalhos até aqui realizados. São apresentados comentários sobre os primeiros resultados na área de caracterização de inclusões e destacados os próximos passos. Destaca-se que, nesta sessão de Diagramas de Fases do presente congresso, resultados de diversos trabalhos da rede estarão sendo apresentados, não sendo, portanto, aqui duplicados. O caráter aberto da rede e seu foco em temática pré-competitiva são salientados.

Palavras-chaves: TECOMAT; Termodinâmica computacional; Fabricação de aço; Caracterização de inclusões.

COMPUTATIONAL THERMODYNAMIC NET APPLIED TO THE DEVELOPMENT OF ADVANCED MATERIALS: INCLUSIONS IN STEEL

Abstract

A cooperative research network was created in order to offer an use of the computational thermodynamic to the development of advanced materials. Having in mind that the steels have a strategic position in Brazil, mainly those with high value, the network decided to work out with non-metallic inclusions as they play an important role for the quality of these steels. The network is composed by a group of academic and research Institutions as well as some steelmaking industries. This paper presents the main steps for the network creation, the identification of some objectives, and finally an extract of the adopted methodology as well as the results of the works carried out up to now. Some comments were introduced for the first results of the inclusion characterization and the next steps were highlight. It is interesting to point out that in this Congress section many papers related to the network will be presented. The open nature of the network as well as its focus in a pre-competitive matter is emphasized.

Key words: TECOMAT; Computational thermodynamic; Steelmaking; Inclusion characterization.

¹ *Contribuição técnica apresentada na 61º Congresso Anual da ABM, de 24 a 27 de julho de 2006, Rio de Janeiro – RJ*

² *Membro da ABM, Eng. Metalúrgico, PhD, Prof. da PUC-Rio, Rio de Janeiro-RJ, e-mail: avillez@dcmm.puc-rio.br*

³ *Membro da ABM, Engenheiro Metalúrgico, PhD, Diretor Técnico do IBQN, Professor da EEIMVR-UFF, Volta Redonda RJ, andre@metal.eeimvr.uff.br, e-mail: andre@metal.eeimvr.uff.br*

⁴ *Membro da ABM, Eng. Metalúrgico, Doutor, Prof. do Centro Universitário da FEI – UNIFEI, Pesquisador do IPT-LMMC, e-mail: fbene@ipt.br*

⁵ *Membro da ABM, Prof. Dr. - Engenharia Mecânica - Núcleo de Caracterização de Materiais - Universidade do Vale do Rio dos Sinos/UNISINOS, e-mail: cmoraes@unisinors.br*

1 INTRODUÇÃO

Na década de 1970 teve origem a aplicação de métodos computacionais à solução de problemas termodinâmicos dentro de um enfoque consistente e prático que permitiu o desenvolvimento hoje observado. Já na década de 1980, pesquisadores Brasileiros participaram dos esforços internacionais no sentido de a) estabelecer as bases para um esforço internacional consistente e b) desenvolver técnicas e pesquisas nesta promissora área. Na década de 1990, a comunidade da área de Metalurgia e Materiais se organizou, para desenvolver de forma sistemática a termodinâmica computacional (TC) no Brasil realizando em 1997 o 1º Workshop Brasileiro de TC, com a presença de três das maiores autoridades mundiais na área. Em 1998, foi estabelecido o Comitê Brasileiro de Diagramas de Fases de Materiais (CBDFM) com apoio da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais. Este comitê atualmente conta com a participação voluntária de representantes de diversas instituições de pesquisa e ensino, e de duas empresas. Em 1999 realizou-se o 2º Workshop Brasileiro de TC. Em 2002, realizou-se um Workshop na PUC dedicado à disseminação dos conceitos de cálculos por primeiros princípios e métodos para modelamento estrutural (*phase field*, etc.). Dessas reuniões, o Comitê concluiu que as bases para a implantação, no Brasil, de uma comunidade ativa em TC estavam lançadas e que o desafio estava em progredir para as duas áreas de modelamento que fazem importantes interfaces com a TC: a) área de cálculos por primeiros princípios; e b) a área de modelamento de transformações (difusionais ou não). Em 2004, o 1º TECOMAT (Workshop de Termodinâmica Computacional Aplicada a Materiais Avançados) reuniu quase todos os atuais colaboradores do Comitê Brasileiro de Diagramas de Fases de Materiais e pesquisadores acadêmicos e da indústria interessados em desenvolver ligas especiais, para discutir os temas de desenvolvimento potenciais da termodinâmica aplicada ao desenvolvimento do aço. Embora o escopo da termodinâmica computacional no desenvolvimento de materiais e otimização de processos seja amplo, os organizadores entenderam que o tema aços tem importância estratégica para o Brasil e, por isso, requer um desenvolvimento científico apropriado. No encontro, foi apresentada a situação atual de cada grupo envolvido e as necessidades das indústrias brasileiras presentes. O resultado final deste "workshop" foi um documento contendo as direções para as futuras ações do CBDFM e para a formação de uma rede cooperativa de pesquisa. Verificou-se que um dos grandes temas atuais na indústria siderúrgica no qual a TC poderia ser útil é o controle das inclusões não-metálicas.

Este artigo apresenta os principais pontos norteadores da Rede TECOMAT esperando que esta rede possa ser ampliada com a participação de novas indústrias e novos pesquisadores.

2 FUNDAMENTOS PARA A FORMAÇÃO DA REDE TECOMAT

O encontro de 2004 foi organizado por três dos autores (ACS, RRA e FB) com o patrocínio de um projeto CNPq e sediado na PUC-Rio. Ele teve a participação de mais de 15 pessoas oriundas de 8 instituições de ensino e pesquisa e 7 indústrias. Neste encontro três palestras da indústria, sobre aspectos importantes para a siderurgia brasileira abriram os trabalhos; em seguida, os participantes foram

divididos em dois grupos de trabalhos que deveriam discutir e responder perguntas de um questionário elaborado pelos organizadores do encontro. O resultado deste encontro foi uma visão de áreas que se beneficiariam de desenvolvimento científico e tecnológico.

Os resultados dos Grupos de Produtos e de Processos de Aciaria estão nos Quadros 1 e 2, não necessariamente na ordem de importância. Ainda no primeiro encontro, foram discutidos conceitos gerais para a organização da rede que estão apresentados nos Quadros 3 e 4. A escolha final das áreas de pesquisa que foram submetidas dentro do projeto apresentado ao CNPq foi realizada num segundo encontro sediado no IPT-SP

Quadro 1. Temas de pesquisa sugeridos em Processos de Aciaria- Resultado do 1º TECOMAT

Análise química em tempo real
Evolução das transformações das inclusões ao longo do processo
Controle automático das inclusões no distribuidor
Propriedades físico-químicas das escórias
Pesagem de sistemas de grande porte para controle de adições e correções
Modelagem dos processos para a previsão da composição química
Equilíbrios importantes: formação de nitretos, fosfatos, metal-refratário e metal-escória
Sistemas de ligas estratégicos (preço ou disponibilidade): V, Co, Ni, Ti, Mo, Nb, W e CaF_2
Impurezas e elementos de combinação: Gases, S, P e Ti, Al, C, V, Ca, Mn, B, Zr, Zn e Sn como impureza, caso a parcela de aço produzido por FEA aumente

Quadro 2. Temas de pesquisa sugeridos em Produtos de Aciaria- Resultado do 1º TECOMAT

Aços para indústria automobilística, com a restrição da globalização sistêmica
Desenvolvimento de aços planos avançados: Dual Phase, Martensíticos, TRIP e Complex Phase
Aços especiais para a indústria petrolífera resistentes à corrosão na presença de H_2S
Aços inoxidáveis contendo 13% de Cromo
Aços contendo V, Mo, Ti e Nb
Controle de impurezas (MnS, H e P)
Difusividade dos gases

Quadro 3. Características negativas em uma rede cooperativa de pesquisa.

Fonte de recursos para pesquisa (apesar de poder contemplar uma pequena quantidade de material de consumo e/ou equipamentos pequenos)
Grupo para solucionar problemas específicos de cada empresa
Meio para apoiar atividades comerciais tais como uma metodologia de análise, um programa ou uma base de dados particular

Quadro 4. Características positivas importantes em uma rede cooperativa de pesquisa.

Concentrar esforços em um ou mais temas comuns às instituições participantes
Compartilhar o conhecimento, os recursos humanos e a infra-estrutura laboratorial das instituições participantes
Realizar Workshops e Conferências
Realizar cursos
Apoiar a participação de pesquisadores em conferências
Facilitar a obtenção de recursos para pesquisa
Permitir o intercâmbio dos pesquisadores entre as instituições participantes por curtos períodos de tempo
Evitar a duplicação e superposição de competências e recursos
Desenvolver aplicações de termodinâmica computacional em casos pré-competitivos

Em função da importância com a qual o tema “refino-aciaria” apareceu nos resultados dos trabalhos dos grupos e, dentro deste tema, a importância atribuída às inclusões não-metálicas, o grupo decidiu focar os esforços em atividades que fossem importantes para a indústria brasileira na direção de melhorar o controle inclusonário dos processos de elaboração e refino. A tecnologia de fabricação do aço teve um grande avanço durante os últimos 25 anos. Uma das áreas que mais avançou foi o controle e redução do nível de impurezas e inclusões não-metálicas. Adicionalmente, a área de engenharia de inclusões se consolidou como essencial em diversas famílias de produtos. A idéia de aço limpo (*clean steel*) muitas vezes inclui requisitos especiais para as inclusões com respeito a sua composição, morfologia, tipo, tamanho e distribuição no aço líquido, na solidificação dos lingotes ou placas e no produto final.⁽¹⁾ Esses requisitos especiais são obtidos através da chamada engenharia de inclusões, ou seja, no controle de processos de modo a obter inclusões adequadas à aplicação prevista para o aço.⁽²⁾ A Figura 1 apresenta uma visão da pesquisa desenvolvida internacionalmente sobre o tema.

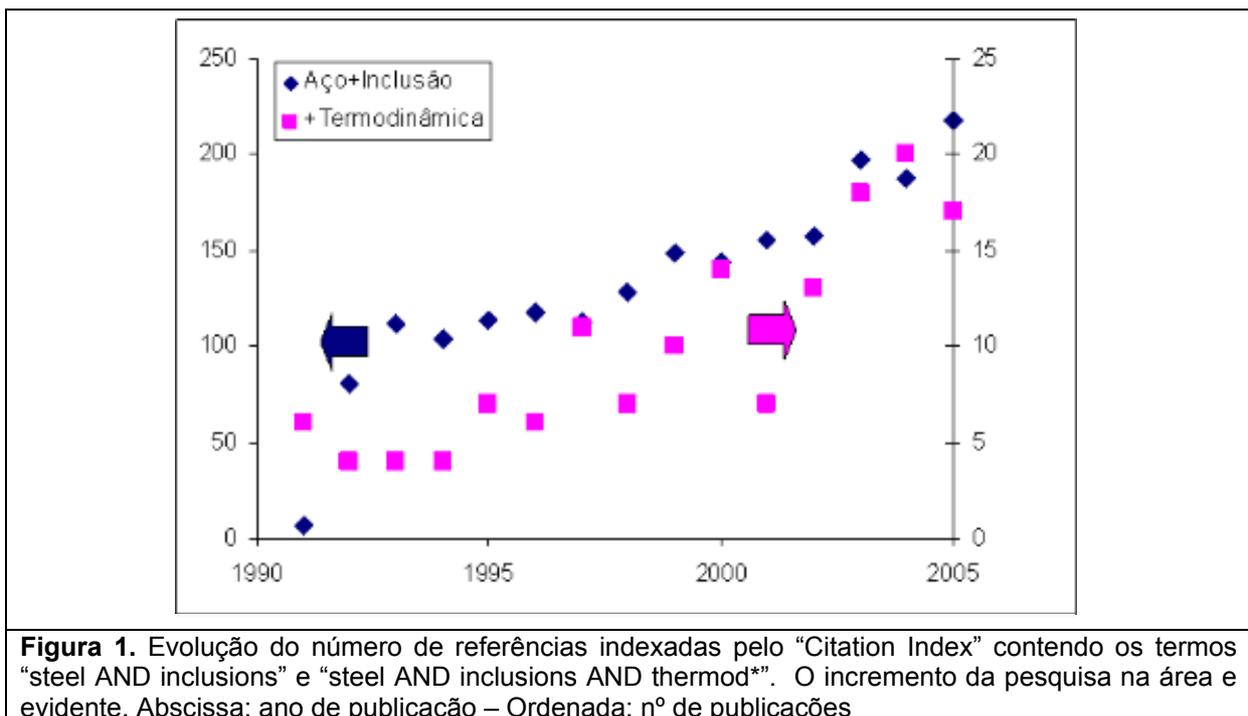


Figura 1. Evolução do número de referências indexadas pelo “Citation Index” contendo os termos “steel AND inclusions” e “steel AND inclusions AND thermod*”. O incremento da pesquisa na área é evidente. Abscissa: ano de publicação – Ordenada: nº de publicações

Os resultados do primeiro e segundo encontros pré-formação da rede nortearam o projeto apresentado ao CNPq e aprovado com o número 400617/2004-8. Os objetivos foram delimitados a dois aspectos dentre os apresentados nos Quadros 1 e 2. *“O projeto pretende desenvolver uma metodologia pré-normativa de caracterização de inclusões capaz de efetivamente ajudar a prever o tipo e tamanho das inclusões formadas nos aços em desenvolvimento no Brasil e criar um banco de dados de metal líquido rico em ferro contendo alguns dos elementos críticos na formação de inclusões e de ligas ferrosas. Os dois principais produtos serão a metodologia de caracterização de inclusões e o banco de dados de metal líquido rico em ferro.”* A conceito chave para a formação da rede é *desenvolvimento pré-competitivo*, pois a rede envolve indústrias, atividade naturalmente competitiva, que possuem interseções de interesses comerciais. A pesquisa pré-competitiva tem por característica não abordar detalhe particular de nenhuma indústria. Isto evita ter efeito direto na competitividade de uma das indústrias em detrimento de outras e também permite a livre disseminação das informações entre todos os participantes da rede.

O primeiro foco da rede, “caracterização de inclusões” é focalizado em desenvolver e “*bench mark*” metodologias de caracterização, etapa pré-competitiva. Uma caracterização confiável é o passo inicial para qualquer ação de melhoria. Uma série de amostras de aços foi fornecida pelas empresas participantes e distribuída somente entre as instituições de pesquisa e ensino. Estas amostras foram identificadas por códigos sem nenhuma correlação com a composição ou empresa que forneceu.

O objetivo desta etapa é avaliar a capacidade de identificação e quantificação de inclusões empregando a metodologia da norma ASTM E45A e outras metodologias disponíveis nos diferentes laboratórios

O segundo foco da rede é a “criação ou atualização seletiva de banco de dados para cálculo de equilíbrio aço-escória-inclusões”. Esta condição é necessária para o desenvolvimento de aplicações confiáveis da termodinâmica computacional nos processos de aciaria. O caráter estratégico decorre da tendência internacional ao “fechamento” dos bancos de dados comerciais: brevemente, antecipa-se que não será possível conhecer a origem dos dados nem os modelos empregados nos principais bancos de dados comerciais. Estes bancos de dados atingiram estágio competitivo e “fecham-se” como defesa em relação à competição. Isto torna seu emprego dependente na confiança no fornecedor e limita o desenvolvimento para aplicações de interesse local.

O projeto aprovado e em andamento envolve atualmente as instituições e os pesquisadores apresentados na Tabela 1 por ordem alfabética. Estes pesquisadores são as interfaces de suas organizações com a rede.

Tabela 1. Instituições e pesquisadores coordenadores associados ao projeto.

CSN	Katsujiro Suzaki
FAENQUIL - DEMAR	Carlos A. Nunes Gilberto C. Coelho
FEI	Luiz Carlos Martinez
GERDAU - Aços Finos Piratini	Luis A. Colembergue Klujszo
INT-RJ	José B. de Campos
IPT-SP	Flávio Beneduce Neto
PUC-Rio - DCMM	Fernando C. Rizzo Assunção Roberto R. de Avillez
UFF - EEIMVR	André L. V. da Costa e Silva
UFRGS - LASID	Antônio Cezar F. Vilela
UNISINOS - NucMat	Carlos Alberto M. Moraes
VILLARES	Alberto Imoto Denise C. de Oliveira

3 BREVE RELATO DA 1ª OFICINA DA REDE TECOMAT

O primeiro encontro para discussão de resultados ocorreu no Centro Universitário FEI, Campus Liberdade, em São Paulo, 26 de setembro de 2005. Este encontro contou com a participação de todas as instituições e empresas envolvidas. O encontro foi aberto, através de carta convite, para outras empresas. Enviaram representantes as empresas: Aços Villares, CSN, Gerdau e Alguns dos principais resultados deste encontro estão resumidos a seguir.

O grupo da UNISINOS e da UFRGS fez um trabalho conjunto de caracterização de inclusões nas amostras de aços distribuídas, empregando microscopia óptica, e microscopia eletrônica de varredura. O teor de oxigênio total de cada uma das amostras foi também analisado. A microscopia eletrônica permitiu identificar o tipo de óxido por espectroscopia por dispersão de energia e constatar a dificuldade de observar inclusões de alumina, em alguns aços, com o aumento de 100X determinado pela norma, utilizando microscopia ótica. Não se observou uma correlação evidente entre quantidade de inclusões e teor de oxigênio total, discrepância que pode estar associada com a limitação imposta pelo aumento de 100X, que impede de computar todas as inclusões, assim como com a padronização dos planos a amostrar na microscopia ótica. Os resultados deste grupo ainda precisam ser comparados com os resultados dos demais grupos.

O grupo da PUC-Rio e da UFF apresentou resultados preliminares do desenvolvimento de um banco de dados envolvendo sistemas pseudo-binários contendo TiO_2 e os óxidos Al_2O_3 , FeO , MgO e MnO . A escória líquida foi descrita pelo modelo quasi-químico de Kapoor-Frohberg-Gaye e os óxidos sólidos como compostos estequiométricos. Esta ação é importante no desenvolvimento de banco de dado a ser empregado na modelagem do sistema escória-metal líquido.

O grupo do IPT e da UNIFEI além de contribuir com os trabalhos da PUC-Rio e UFF apresentou caracterização de inclusões utilizando a técnica Electron Beam Button Melting Test mostrando a impossibilidade da utilização dessa técnica quando há inclusões menos estáveis termodinamicamente mas perfeitamente aplicável a materiais contendo inclusões de alumina.

Os demais relatos não apresentaram resultados experimentais mas abordaram alguns aspectos teóricos e práticos associados com a caracterização de inclusões. Foram sugeridos três temas para pesquisas futuras com características

mais tecnológicas: redução do tempo de análise do tamanho e da composição de inclusões, em particular, aquelas contendo Ca; emprego de estatísticas de valor extremo; e definição de procedimentos para a preparação de amostras.

A importância crítica dos protocolos de análise, sobre os resultados foi evidenciada. Decidiu-se estabelecer um protocolo detalhado com respeito a nomenclatura dos planos de amostragem em diferentes tipos de semi-acabados e de todo o procedimento de preparação de amostras para caracterização inclusonária para garantir, entre outros aspectos, que o efeito da anisotropia das inclusões seja o mesmo para todos os observadores.

Presente e Futuro

A 2ª Oficina da Rede TECOMAT está ocorrendo simultaneamente com este Congresso Anual da ABM. Os relatos dos vários trabalhos estão sendo apresentados nesta sessão de Diagramas de Fases. Uma última oficina dentro do escopo original do projeto deverá ser organizada até o final do ano e pretende-se propor uma continuação do projeto junto às agências de fomento.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os primeiros resultados práticos apresentados relativos à caracterização de inclusões já apontam para a necessidade de uma atenção especial na utilização da NORMA ABNT E45 nas análises via Microscopia Ótica. Especial necessidade de um protocolo único de preparação e análise foi detectada e será definida pela rede. Os resultados iniciais indicam que a escolha dos temas foi acertada em vista do potencial de benefícios pré-competitivos esperados de (a) definição de um protocolo único, uniforme, para os exames por Microscopia Ótica conforme ASTM E45, (b) potencial de realização de um “round robin” das técnicas mais empregadas, visando qualificar sua confiabilidade e reprodutibilidade, características básicas de uma técnica de caracterização efetiva e (c) confirmação das dificuldades antecipadas na comparação e correlação entre diferentes tipos de análises que visam a caracterizar a limpeza interna, em especial considerando as diferentes práticas de elaboração e desoxidação empregadas nos aços usados como amostras.

Antecipa-se que, até a conclusão desta etapa do projeto, estes problemas estarão bem caracterizados e resultados conclusivos serão disponibilizados aos participantes da rede.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo apoio financeiro para o desenvolvimento deste projeto e aos demais participantes da rede pela colaboração.

REFERÊNCIAS

- 1 Holappa, L.; Helle, A. S. Inclusion control in high-performance steels. *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 53, p. 177-186, 1995.
- 2 Costa e Silva, A., Refino dos Aços - Avanços e Perspectivas. In: *Simpósio Aços: Perspectivas para os próximos 10 anos*, p. 55-62, Rio de Janeiro, 2002.