

Modelagem da formação não isotérmica da austenita em um aço de baixo carbono

(Modeling non-isothermal austenite formation in low carbon steel)

Resumo

A formação da austenita em condições isócronas em um aço de baixo carbono e microligado com Nb, a diferentes taxas de aquecimento e usando curvas dilatométricas, foi estudada utilizando o modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK), em conjunção com a relação funcional entre a energia de ativação aparente e a taxa de aquecimento. Mostrou-se que essa relação funcional é logarítmica e que a energia de ativação aparente diminui de 152,5 para 118,1 kJ/mol, quando a taxa de aquecimento aumenta de 0,1 para 16 K/s, para o expoente n da equação de JMAK igual a 1,0.

Palavras-chave: Transformações de fase, modelagem, cinética, aço de baixo carbono.

Abstract

The austenite formation under isochronal conditions in Nb micro-alloyed low carbon steel was studied using the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) model, for different heating rates and by means of dilatometric curves. The functional relationship between the apparent activation energy and heating rate was used in addition to this model. It was shown that this functional relationship is logarithmic and that the apparent activation energy decreases from 152.5 to 118.1 kJ/mol when the heating rate increases from 0.1 to 16 K/s, with the n exponent of the JMAK equation equal to 1.0.

Keywords: Phase transformations, modeling, kinetics, low carbon steel.

1. Introdução

A análise dilatométrica é uma técnica fundamental para o estudo das transformações de fases no estado sólido de ligas ferrosas e é usada no estudo da cinética das transformações de fases, estabelecendo uma relação entre as frações da fase transformada, a temperatura, as composições das fases e os dados dilatométricos (Kop et al., 2001; García de Andrés et al., 2002; Oliveira et al., 2007; Zhao et al., 2001).

Geraldo Magela Rodrigues
de Almeida

Mestre em Engenharia de Materiais
REDEMAT/UFOP
E-mail: gmr Almeida@gmail.com

Sara Silva Ferreira de Dafé

Mestre em Engenharia de Materiais
REDEMAT/UFOP
E-mail: saradafe@gmail.com

Fernando Lucas Gonçalves
de Oliveira

Mestre em Engenharia de Materiais
E-mail: fernando.oliveira@ecp.fr

André Barros Cota

Professor Associado
DEFIS/REDEMAT/UFOP
E-mail: abcota@ufop.br

A cinética de transformação da austenita no resfriamento contínuo tem sido estudada por vários autores (Kop et al., 2001; Zhao et al., 2001; Bengochea et al., 1998; Cota et al., 2004; Gomes et al., 2003) e a evolução da fração transformada sugere que esta pode ser predita pelo modelo clássico de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) (Johnson-Mehl, 1939; Avrami, 1939; Kolmogorov, 1937). Quando a transformação ocorre em aquecimento contínuo, a cinética de formação da austenita também segue esse modelo de JMAK, supondo uma taxa de aquecimento constante (Kop et al., 2001; García de Andrés et al., 2002; Caballero et al., 2001; Zhao et al., 2002; Singh et al., 2007).

Recentemente, estudos têm ilustrado (Singh et al., 2007; Sahay et al., 2005) as limitações de aplicação do princípio da aditividade, onde perfis não isotérmicos são discretizados em pequenas isothermas, junto com o modelo de JMAK, para condições não isotérmicas.

O modelo clássico JMAK é dado por:

$$f = 1 - \exp(-Kt^n) \quad (1)$$

onde $f(t)$ é a fração transformada após o tempo t , n é o expoente de Avrami e o fator K é uma função da temperatura e representa a influência da taxa de aquecimento sobre as taxas de nucleação e crescimento, e é dado pela equação de Arrhenius:

$$K = K_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2)$$

onde K_0 é o coeficiente pré-exponencial, R é a constante universal dos gases ideais e Q é a energia de ativação aparente para a transformação de fase, incorporando entalpias de ativação de todos os processos atômicos que constituem a transformação de fase global.

Embora essas equações tenham sido, originalmente, descritas para transformações de fases em condições isotérmicas, usando o princípio da aditividade, onde perfis não isotérmicos são discretizados em pequenas isothermas, elas são, frequentemente, usadas para

modelar as transformações de fases em condições não isotérmicas (Singh et al., 2007; Sahay et al., 2005).

Para condições não isotérmicas, uma relação funcional correlacionando a energia de ativação aparente com a taxa de aquecimento foi observada em vários sistemas, incluindo a cristalização de três sistemas de poliéster aromático linear (Sahay et al., 2005) e a transformação da austenita em ferrita no resfriamento contínuo (Singh et al., 2007). Foi mostrado que a cinética de formação isócrona da ferrita poderia ser, precisamente, descrita, quando essa relação funcional é usada em conjunção com o modelo de JMAK. Essa relação funcional foi deduzida semi-empiricamente e é dada por:

$$Q = Q_0 + Q_1 \ln(txa) \quad (3)$$

onde txa é a taxa de aquecimento em K/s e Q é a energia de ativação aparente: Q_0 e Q_1 são constantes.

No presente trabalho, a formação da austenita em condições isócronas em um aço de baixo carbono e microligado com Nb, a diferentes taxas de aquecimento e usando curvas dilatométricas, foi estudada utilizando o modelo de JMAK, em conjunção com a relação funcional entre a energia de ativação aparente e a taxa de aquecimento. Finalmente, uma explicação mecanicista dessa relação funcional foi dada.

2. Materiais e métodos

O material utilizado nesse trabalho é um aço de baixo carbono, de fabricação industrial, microligado com Nb, com a composição química (% em massa): 0,15C; 1,42Mn; 0,37Si; 0,052Al; 0,023P; 0,009S; 0,031Nb; 0,0042N. A microestrutura inicial das amostras consiste de ferrita (fração volumétrica igual a 0,73) e perlita, com tamanho médio do grão ferrítico de $(18 \pm 1) \mu\text{m}$ (Figura 1).

A análise dilatométrica foi realizada em um dilatômetro de temperatura Adamel-Lhomargy LK 02, utilizando amostras cilíndricas com 2 mm de diâmetro e 12 mm de comprimento e taxas

de aquecimento de 0,1° C/s, 1° C/s, 5° C/s, 10° C/s, 13° C/s e 16° C/s.

Na Figura 2, as temperaturas de início e fim de formação da austenita no aquecimento, Ac_1 e Ac_3 , respectivamente, estão indicadas, juntamente com a temperatura Af , que é definida como a temperatura de início da transformação da ferrita em austenita, para a taxa de aquecimento de 1° C/s. O diagrama de transformação no aquecimento contínuo (TAC) do aço em estudo é mostrado na Figura 3 (Oliveira et al., 2007).

A determinação da fração de austenita formada foi realizada utilizando a regra da alavanca, cujo método de aplicação à curva dilatométrica (Bhadeshia, 1992) no aquecimento contínuo está ilustrado na Figura 2.

3. Resultados e discussões

As frações de austenita formada no aquecimento contínuo como uma função do tempo são mostradas na Figura 4, para as diferentes taxas de aquecimento. Observa-se que a formação da austenita ocorre em dois estágios. O primeiro é a transformação da perlita em austenita, que se inicia à temperatura Ac_1 e termina à temperatura Af . O segundo estágio é a transformação da ferrita em austenita, que se inicia à temperatura Af e termina à temperatura Ac_3 . Ambas as transformações ocorrem pelos processos de nucleação e crescimento.

A partir dos valores das frações de austenita transformada como uma função do tempo, os parâmetros K_0 , Q e n da equação de JMAK foram determinados por regressão linear múltipla.

O modelamento da fração da austenita formada como uma função do tempo usando as equações de JMAK, a lei de Arrhenius e a regressão linear múltipla, resulta na obtenção de três parâmetros K_0 , Q e n , para cada taxa de aquecimento, ou seja, 18 parâmetros (foram utilizadas nesse trabalho, 6 taxas de aquecimento). Pode-se concluir que esse método não permite descrever a cinética de transformação de fases para todas as taxas

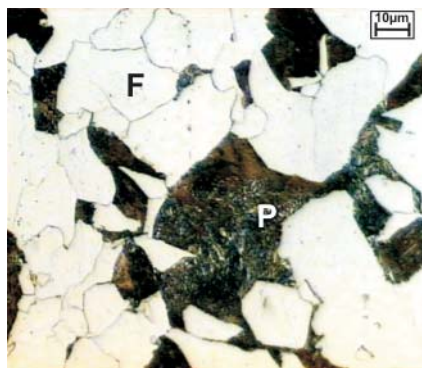


Figura 1 - Microestrutura da amostra do aço obtida por microscopia ótica. Ataque nital 4%. Ferrita=F e perlita=P.

de aquecimento com um único conjunto de parâmetros, o que torna esse método não eficaz para o cenário industrial, onde se deseja um mínimo de parâmetros do modelo.

Assim, desenvolveu-se um método de pesquisa global, supondo que a energia de ativação aparente varia com a taxa de aquecimento (eq. 3), com o objetivo de obter um único conjunto de valores de n e K_0 , aplicável a todas as taxas de aquecimento, que resultou em um erro mínimo caracterizado pelo alto valor de R^2 (coeficiente de correlação) entre o modelo e os dados experimentais. A Figura 5 mostra que existe uma relação logarítmico-linear entre a energia de ativação aparente e a taxa de aquecimento, com $R^2=0,998$. Observa-se, na Tabela 1, que apenas 4 parâmetros são suficientes para modelar a cinética de transformação para todas as taxas de aquecimento.

A Figura 6 mostra a fração de austenita formada como uma função do tempo, calculada pela regra da alavanca aplicada à curva dilatométrica, medida por metalografia (Oliveira et al., 2007) e pelo modelamento proposto nesse trabalho, para as taxas de aquecimento de 0,1 e 1,0° C/s. No trabalho desenvolvido por Oliveira et al. (Oliveira et al., 2007) selecionaram-se várias temperaturas para a interrupção do aquecimento contínuo por têmpera para investigar o progresso da formação da austenita, no intervalo entre Ac_1 e Ac_3 , e mediu-se, por análise metalográfica, a fração de austenita como uma função da

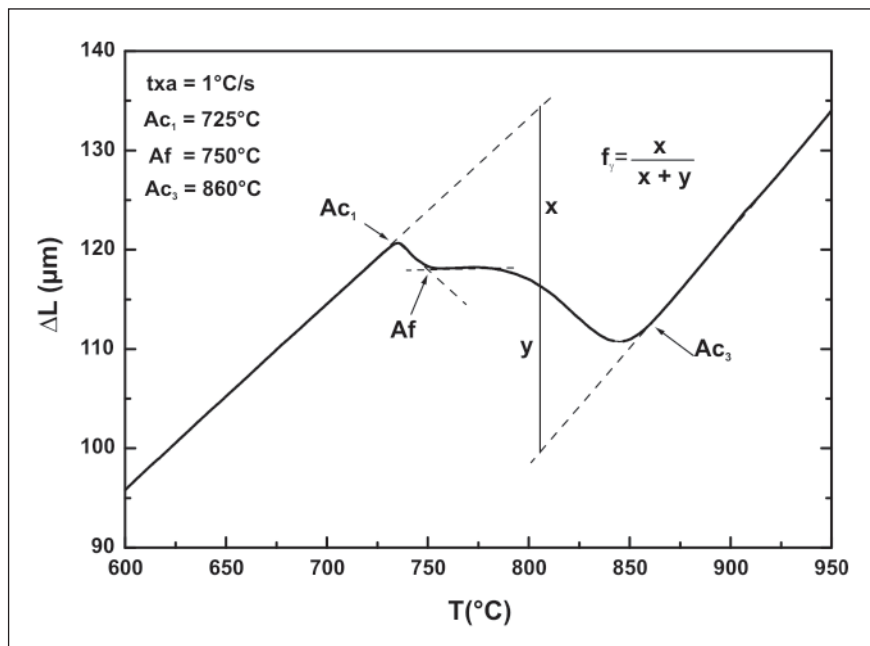


Figura 2 - Curva dilatométrica para a taxa de aquecimento de 1°C/s, com a indicação das temperaturas críticas de formação da austenita: Ac_1 e Ac_3 - temperaturas de início e fim de formação da austenita, respectivamente; Af - temperatura de início da transformação da ferrita em austenita (Oliveira et al., 2007). Método de aplicação da regra da alavanca à curva dilatométrica.

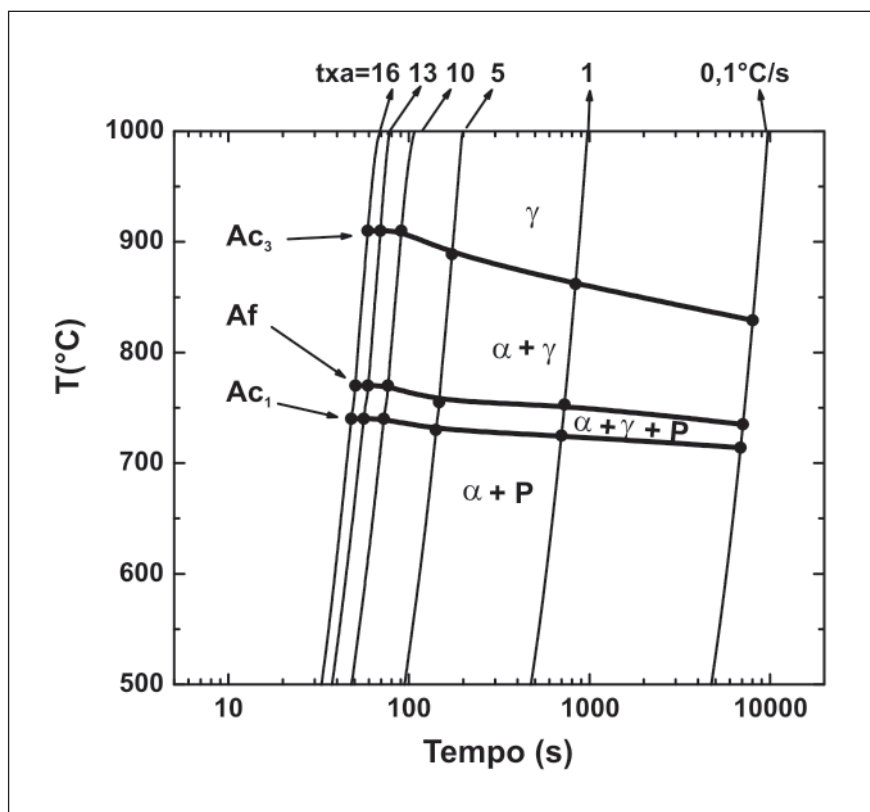


Figura 3 - Diagrama de transformação no aquecimento contínuo (TAC) do aço em estudo, a partir de uma microestrutura inicial constituída de ferrita + perlita, onde α é a ferrita, P é a perlita e γ é a austenita (Oliveira et al., 2007).

temperatura (ou tempo) apenas para as taxas de aquecimento de 0,1 e 1,0°C/s. Observa-se que os valores da fração de austenita medidos por metalografia situam-se muito próximos da curva obtida por modelamento.

O valor de n , expoente da equação de JMAK, depende do sítio de nucleação preferencial, ou seja, se a transformação se dá, predominantemente, por nucleação na superfície, nas arestas ou nos pontos tríplexes originais, conforme apontado por Cahn (Cahn, 1956). O valor de $n=1$, obtido nesse trabalho, indica que a nucleação é predominante nas interfaces das fases. Essa característica de formação da austenita a partir de uma microestrutura inicial constituída de ferrita e perlita tem sido descrita em trabalhos recentes (García de Andrés et al., 2002; Oliveira et al., 2007), que relatam que a nucleação de austenita dentro da perlita ocorre, preferencialmente, nas interfaces da cementita. A transformação da perlita em austenita ocorre rapidamente, já que as distâncias médias de difusão dos átomos de carbono são da ordem do espaçamento interlamelar. A segunda etapa é a transformação da ferrita em austenita e a taxa de crescimento da austenita a partir da ferrita é mais lenta que na perlita e também é controlada pela difusão dos átomos de carbono na austenita.

Resultados da literatura têm mostrado que existe uma relação funcional entre a energia de ativação aparente e a taxa de aquecimento ou resfriamento. Torres et alii (Torres et al., 2002) mostraram que a energia de ativação aparente durante a recristalização isócrona de um aço baixo carbono laminado a frio diminuiu de 520 para 259 kJ/mol quando a taxa de aquecimento era aumentada. Singh et alii (Singh et al., 2007) modelaram a transformação não isotérmica da austenita em ferrita em aços baixo carbono e mostraram que a energia de ativação aparente diminuiu quanto era aumentada a taxa de resfriamento.

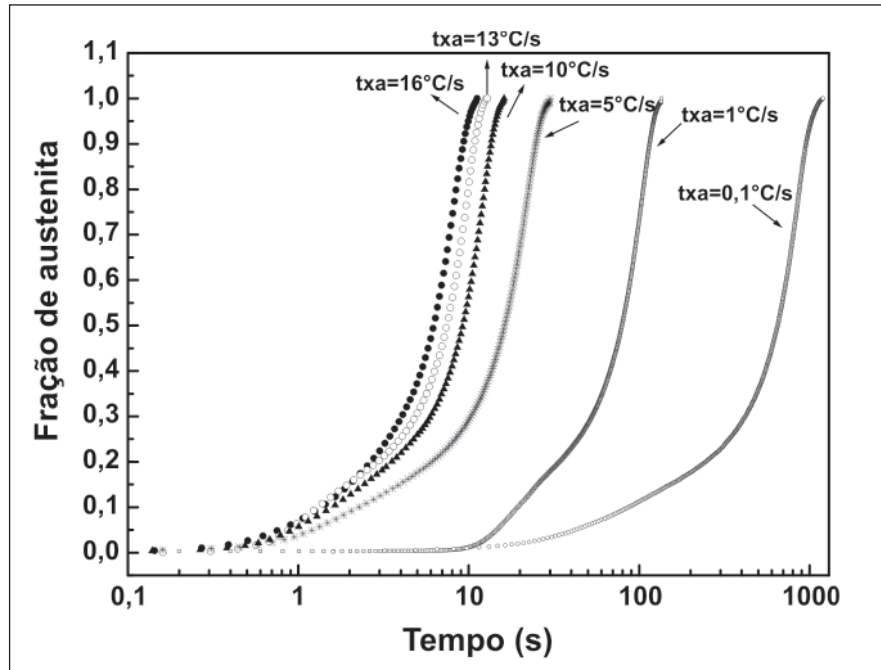


Figura 4 - Frações de austenita formada como uma função do tempo para as diferentes taxas de aquecimento.

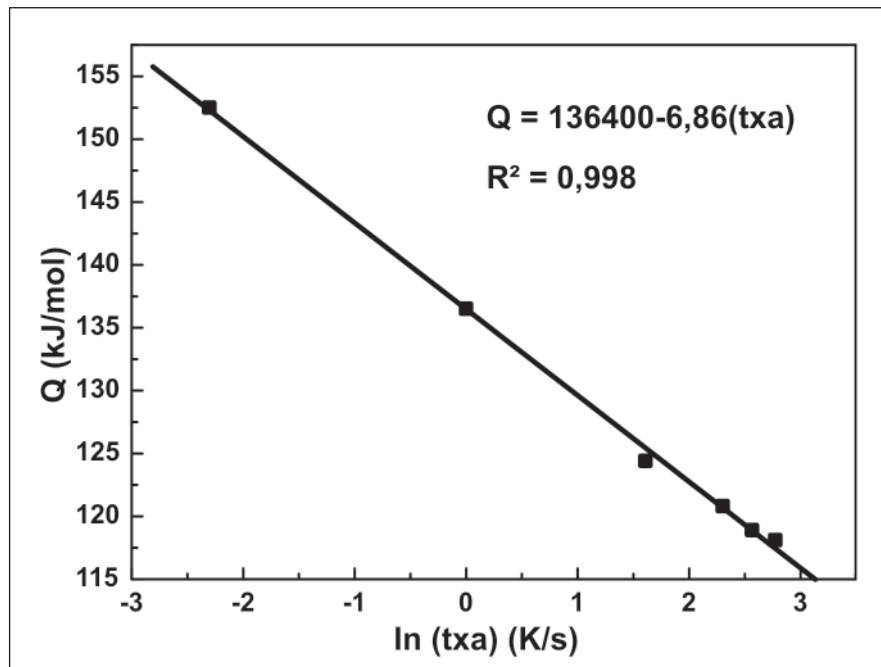


Figura 5 - Energia de ativação aparente, Q , como uma função da taxa de aquecimento (txa).

Tabela 1 - Parâmetros do modelo da cinética de austenitização em condições isócronas.

K_0 (s^{-1})	n	Q_0 (kJ/mol)	Q_1 (kJ/mol)
42000	1	136,4	-6,86

A cinética de formação da austenita depende de dois fatores: da magnitude da barreira de energia de ativação e do número de átomos com energia alta o suficiente para vencer essa barreira. A fração de átomos com energia térmica igual ou maior que a energia de ativação, Q , é dada pela equação de Boltzmann. Quando a temperatura aumenta, tem-se um aumento exponencial na fração de átomos com energia térmica igual ou maior que Q . Para baixas taxas de aquecimento ou próximas da situação de equilíbrio, a distribuição de átomos é capaz de relaxar de um estado de alta energia dos átomos a baixas temperaturas (ferrita + perlita) para um estado de mais baixa energia (fase austenita), quando a temperatura aumenta. Além disso, a altas taxas de aquecimento, o sistema estará muito distante da situação de equilíbrio e a relaxação de estados de energia de altos para baixos valores acompanha o aumento de temperatura. Como resultado, com o aumento da temperatura, a fração de átomos com energia térmica alta o suficiente para vencer a barreira de potencial será maior que a fração esperada próxima à condição de equilíbrio. Portanto, essa diferença entre a fração de átomos real e a fração de equilíbrio aumentará com o aumento da taxa de aquecimento, que é o resultado observado nesse trabalho.

4. Conclusões

Esse trabalho mostra uma metodologia conveniente para descrever a cinética de austenitização utilizando a equação de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov. Mostrou-se que existe uma relação funcional logarítmica-linear entre a energia de ativação aparente e a taxa de aquecimento no processo de austenitização de um aço baixo carbono e microligado com Nb. Mostrou-se que a energia de ativação aparente diminui de 152,5 para 118,1 kJ/mol, quando a taxa de aquecimento aumenta de 0,1 para 16°C/s. O valor de $n=1$, expoente da equação de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov, obtido nesse trabalho, indica que a nucleação é predominante nas interfaces ferrita/cementita e da cementita com as colônias de perlita.

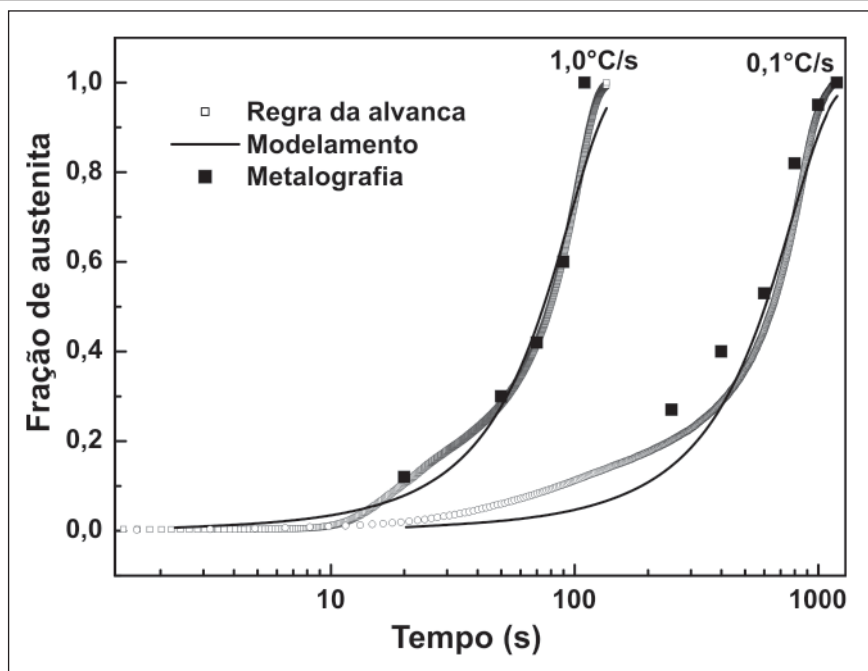


Figura 6 - Fração de austenita formada como uma função do tempo, calculada pela regra da alavanca aplicada à curva dilatométrica, medida por metalografia (Oliveira et al., 2007) e pelo modelamento proposto nesse trabalho, para as taxas de aquecimento de 0,1 e 1,0°C/s.

O ajuste da curva obtida pelo modelamento da cinética de austenitização aos dados experimentais, obtidos pela aplicação da regra da alavanca à curva dilatométrica e por metalografia, para as taxas de aquecimento de 0,1 e 1,0°C/s, foi eficiente e essa metodologia mostra-se uma ferramenta importante e rápida para o estudo da cinética de transformações de fases nos aços.

5. Agradecimentos

Ao CNPq, pelo financiamento das bolsas de mestrado.

6. Referências bibliográficas

- AVRAMI, M. Kinetics of phase change I. General theory. *Journal of Chemical Physics*, v. 7, p. 1103-1112, 1939.
- BENGOCHEA, R. et alii. Microstructural evolution during the austenite-ferrite transformation from deformed austenite. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 29, p. 417-426, 1998.
- BHADESHIA, H.K.D.H. Modeling of steel welds. *Materials Science and Technology*, v. 8, p. 123-133, 1992.
- CABALLERO, F.G. et alii. Modeling of kinetics of austenite formation in steels with different initial microstructures. *ISIJ International*, v. 41, p. 1093-1102, 2001.
- CAHN, J.W. The kinetics of grain boundary nucleated reactions. *Acta Metallurgica*, v. 4, p. 449-459, 1956.
- COTA, A.B. et alii. Effect of the austenitizing temperature on the kinetics of ferritic grain growth under continuous cooling of a Nb microalloyed steel. *Scripta Materialia*, v. 51, p. 721-725, 2004.
- GARCÍA DE ANDRÉS, C. et alii. Application of dilatometric analysis to the study of solid-solid phase transformation in steels. *Materials Characterization*, v. 48, p. 101-111, 2002.

- GOMEZ, M. et alii. Modeling of phase transformation kinetics by correction of dilatometry results for a ferritic Nb-microalloyed steel. *ISIJ International*, v. 8, p. 1228-1237, 2003.
- JOHNSON, W., MEHL, R. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans. AIME*, v. 135, p. 416-441, 1939.
- KOLMOGOROV, A. A statistical theory for the recrystallization of metals. *Akad. nauk SSSR, Izv. Ser. Mat.*, v. 1, p. 355-359, 1937.
- KOP, T.A. et alii. Dilatometric analysis of phase transformations in hypoeutectoid steels. *Journal of Materials Science*, v. 36, p. 519-526, 2001.
- OLIVEIRA, F.L.G., ANDRADE, M.S., COTA, A.B. Kinetics of austenite formation during continuous heating in a low carbon steel. *Materials Characterization*, v. 58, p. 256-261, 2007.
- SAHAY, S.S. et alii. Analysis of the non-isothermal crystallization kinetics in three linear aromatic polyester systems. *Thermochimica Acta*, v. 430, p. 23-29, 2005.
- SINGH, S.B. et alii. Modeling non-isothermal austenite to ferrite transformation in low carbon steels. *Materials Science and Engineering A*, v. 445-446, p. 310-315, 2007.
- TORRES, C.E.R. et alii. Study of the kinetics of the recrystallization of cold-rolled low-carbon steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, v. 33, p. 25-31, 2002.
- ZHAO, J.Z. et alii. Kinetics of phase transformations in steels: a new method for analyzing dilatometric results. *ISIJ International*, v.41, p. 492-497, 2001.
- ZHAO, L. et alii. Quantitative dilatometric analysis of intercritical annealing in a low-silicon TRIP steel. *Journal of Materials Science*, v. 37, p. 1585-1591, 2002.
- Artigo recebido em 25/03/2009 e aprovado em 28/08/2009.

Descubra as muitas informações da: **Geologia, Mineração, Metalurgia & Materiais e Engenharia Civil.**



Assine e publique na Rem

Conheça o nosso site: **WWW.REM.COM.BR**