# AVALIAÇÃO DE PRECIPITATOS EM AÇOS BAIXO CARBONO E IF (INTERSTITIAL FREE) ATRAVÉS DA TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL<sup>1</sup>

## André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva<sup>2</sup> Roberto Ribeiro de Avillez<sup>3</sup>

Em trabalho anterior foram discutidos os principais modelos empregados para descrever o comportamento termodinâmico de sistemas a base de ferro em que a precipitação de compostos é relevante. No presente trabalho, estes modelos são aplicados para as condições relevantes ao processamento de aços baixo carbono e *"Interstitial Free"* (IF), avaliando, principalmente, aços contendo precipitações dos elementos C, N, S, Ti e Nb, assim como o efeito desta precipitação sobre os teores em solução destes elementos. Algumas possibilidades e restrições do emprego da termodinâmica computacional no projeto de composição ("*alloy design*") dos aços também são discutidas.

Palavras-chave: termodinâmica computacional, aços interstitial free

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Contribuição apresentada no 56° Congresso da ABM, 16 a 20 de julho de 2001, Belo Horizonte, MG.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Engenheiro Metalúrgico, Membro da ABM, PhD, Diretor Técnico do Instituto Brasileiro da Qualidade Nuclear e Professor da EEIMVR-UFF, Av. Gen Justo 365, 4° andar, 20021-130 Rio de Janeiro, RJ; andrecs@ibqn.com.br

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Engenheiro Metalúrgico, Membro da ABM, PhD, Professor Associado; Pontifícia Universidade Católica, Rua Marques de São Vicente, 225-DCMM, 22453-900 Rio de Janeiro, RJ; avillez@dcmm.puc-rio.br.

## 1. Introdução

Um dos fatores críticos para a obtenção das propriedades desejadas em aços para a conformação é o controle dos elementos intersticiais. Carbono e nitrogênio são responsáveis por diversos problemas, desde o aparecimento do escoamento nítido e, consequentemente, do envelhecimento, até a degradação da formação da textura cristalográfica necessária para o comportamento isotrópico, ou o aumento indesejável das propriedades mecânicas, dificultando a conformação e aumentando o retorno elástico ("spring back").

As estratégias clássicas para a obtenção de elevados níveis de coeficiente de anisotropia, alongamento e coeficiente de encruamento passam por medidas que minimizem a presença de carbono e nitrogênio em solução e pelo controle da textura desejada após recozimento. Assim, teores de carbono suficientes para evitar a dissolução total dos carbonetos durante o recozimento – facilitando a precipitação de cementita— e teores de alumínio adequados para garantir a total precipitação do nitrogênio sob a forma de nitretos têm sido empregados em aços recozidos em caixa. Naturalmente, esta precipitação precisa atingir o equilíbrio durante o recozimento, para minimizar o teor de nitrogênio em solução. Os aspectos termodinâmicos no controle deste processo foram discutidos em outro trabalho [1].

A busca por ciclos de produção mais curtos com valores elevados de coeficientes de anisotropia e outras características associadas a elevada conformabilidade levou ao desenvolvimento dos aços "*Interstitial Free*" (IF). O tratamento destes aços, sob vácuo, permite atingir teores totais de carbono da ordem de 20 ppm (em peso). O controle rigoroso de todas as etapas do processo, do conversor até o lingotamento permite que se atinja teores totais de nitrogênio inferiores a 40 ppm. As limitações impostas por estes valores são de ordem cinética e requerem uma melhoria significativa dos processos desenvolvidos na aciaria.

Por este motivo, a adição de elementos que se combinem com estes intersticiais, formando precipitados que os retirem de solução na maior extensão possível, é crítica para o sucesso dos aços IF. Os elementos escolhidos para a formação destes precipitados foram nióbio, titânio e, ainda, o alumínio. Todos os aços desta família são completamente desoxidados por alumínio até níveis de oxigênio em solução da ordem de 3 ppm, de forma que pode haver excesso de alumínio suficiente para a precipitação de nitretos. Os baixíssimos teores de nitrogênio são, naturalmente, uma restrição a este processo. A escolha do nióbio e do titânio veio naturalmente da bem sucedida e recente experiência com os aços microligados de alta resistência e baixa liga.

Entretanto, a tentativa de aplicar os modelos termodinâmicos simples empregados com relativo sucesso nos aços microligados não foi satisfatória no caso dos aços IF. De fato, as relações entre as quantidades (ou potenciais químicos) dos elementos em questão (C, N, Nb e Ti) são muito diferentes nos aços IF daquelas presentes nos aços microligados. Assim, pode-se esperar inclusive a precipitação nos aços IF de compostos "não esperados" em aços microligados.

As principais aproximações dos modelos simples para aços microligados incluem a seleção "*a priori*" dos equilíbrios a analisar e o emprego do formalismo Wagneriano. A primeira aproximação reduz o número de equações a serem avaliadas simultaneamente, enquanto a segunda torna as equações suficientemente simples para solução analítica com calculadoras científicas. No entanto, a primeira aproximação deixa de incluir compostos não observados em outras famílias de aços, tais como, por exemplo, os carbosulfetos e os fosfetos, que são muito importantes no processo de precipitação e remoção dos intersticiais de solução sólida.

O uso da termodinâmica computacional, método CALPHAD, permite contornar este problema. O método CALPHAD emprega uma base de dados experimentais e modelos termodinâmicos com algum fundamento fisico-químico para descrever as fases que podem ocorrer em um sistema e extrapolar para sistemas multicomponentes. Nas próximas seções são apresentados os conceitos básicos do método CALPHAD e sua aplicação em aços *interstitial free* ao nióbio e titânio.

# 2. A termodinâmica Computacional - CALPHAD

O método CALPHAD envolve três atividades básicas após a coleta experimental de dados termodinâmicos e de equilíbrio de fases.

# 2.1 Otimização das descrições das funções termodinâmicas

A primeira área de ação compreende a descrição uniforme e autoconsistente das propriedades termodinâmicas dos elementos, substâncias, compostos e soluções. A termodinâmica aplicada a determinação do comportamento macroscópico de sistemas heterogêneos foi definida no trabalho clássico de J.W. Gibbs [2] de 1883. Sua sistematização requer medidas de diversas funções termodinâmicas e diagramas de equilíbrio de fase. As funções termodinâmicas se relacionam entre si e não podem assumir valores completamente independentes umas das outras. A energia livre de Gibbs, G, é a função termodinâmica normalmente empregada na modelagem de sistemas a temperatura e pressão constantes. Os parâmetros dos modelos matemáticos que descrevem esta função são calculados pelo ajuste aos dados experimentais pelo método dos mínimos quadrados.

## 2.1.1 Elementos Puros e Compostos Estequiométricos

Kubaschewski [3] recomendou um polinômio (eq. 1) para descrever  $c_p$  em função da temperatura. Neste caso, as expressões para as demais funções termodinâmicas são:

C <sub>p</sub> =	m <sub>3</sub>	$+ m_4 T$	+ m <sub>5</sub> /T <sup>2</sup>	$+ m_6 T^2$	(1)
H=m₁	+ m₃T	+ m <sub>4</sub> T <sup>2</sup> /2	+ m <sub>5</sub> /T	+ m <sub>6</sub> T <sup>3</sup> /3	(2)
$S=m_2$	+ m₃ln T	$+ m_4T$	$- m_5/(2 T^2)$	$+ m_6 T^2/2$	(3)
$G=m_1$ -	$m_2T + m_3T(1 - lnT)$	- m <sub>4</sub> T²/2	- m <sub>5</sub> /(2T)	- m <sub>6</sub> T³/6	(4)

Atualmente, a expressão recomendada pelo SGTE [4], para a energia livre dos elementos puros, inclui, adicionalmente, termos em  $T^7e T^{-9}$ , além dos presentes na equação 4. O efeito das transições magnéticas sobre G é normalmente expresso segundo o formalismo proposto por Indem [5] e descrito por Hillert e Jarl [6].

As funções termodinâmicas que representam energias não têm valor absoluto e, para permitir comparações, são referenciadas a um estado padrão. O estado padrão escolhido para os elementos puros é, normalmente, a fase estável a 298.15K e 0.1 MPa (0.1 MPa=1 bar; 1 atm = 1.01325 bar). Este estado é chamado de SER ("*standard element reference*") e a energia livre dos elementos puros *i*,  ${}^{o}G^{T}_{i,\Phi}$ , referidas a entalpia dos seus estados estáveis  $\Phi$  a 298.15K (H<sup>298.15K</sup><sub>i, $\Phi$ </sub>) são fornecidas pelo banco de dados do SGTE [4]. A energia livre do elemento *i* em uma outra estrutura  $\Pi$ ,  ${}^{o}G^{T}_{i,\Pi}$ , pode ser expressa da mesma forma. A diferença entre  ${}^{o}G^{T}_{i,\Phi}e {}^{o}G^{T}_{i,\Pi}$  é chamada de estabilidade termodinâmica do cristal ("*lattice stability*") do elemento *i* na fase  $\Pi$ . Os compostos seguem este mesmo modelamento .

# 2.1.2 Modelos de Soluções

A energia livre molar das soluções pode ser descrita como:

$$G_m = \sum_i X_i^{\ o} G_i - T\Delta S_m^{ideal} + \Delta G_m^{xc}$$
(5)

Os  $G_{i}^{o'}$  representam a energia livre dos componentes (elementos) puros.  $\Delta G_{m}^{xc}$  é a energia livre de excesso associada ao processo de mistura e sua forma

matemática depende do modelo empregado.  $\Delta S_{m}^{\text{ideal}}$  é a variação de entropia na formação de uma solução ideal [7].

Diferentes modelos fisico-químicos têm sido estabelecidos para a descrição da energia livre de excesso na formação de soluções. O modelo de solução regular [8] é o mais simples. Outros modelos, de complexidade crescente, são modelo quasequímico [9], modelo do átomo central [10], modelo sub-regular de sub-redes [11] e modelo de soluções associadas [12], entre outros. Estes modelos abordam diferentes aspectos da entalpia e da entropia de mistura de soluções reais.

A aplicação sistemática destes modelos na termodinâmica computacional depende da facilidade de manipular as expressões. Duas condições básicas têm sido buscadas nas representações de propriedades de soluções: (a) que sejam de fácil diferenciação e integração e (b) que permitam uma extrapolação consistente dos dados termodinâmicos para sistemas de mais alta ordem. As expansões em série têm sido preferidas para a descrição da energia livre de excesso. As duas principais séries que atendem os requisitos acima e são consistentes com as propriedades básicas de  $\Delta G^{xc}{}_m$  são os polinômios de Legendre e a representação conhecida como de Redlich-Kister [13].

A representação de Redlich-Kiester tem sido preferida por sua simplicidade. Para um sistema binário, o polinômio de Redlich-Kister pode ser descrito como:

$$\Delta G_m^{xc} = {}^{xc} G_m^T = X_1 X_2 \sum_{\nu} L_{\nu}^T (X_1 - X_2)^{\nu}$$
(6)

onde os coeficientes *L* são, de forma geral, dados por:

$$L_{\nu}^{T} = A_{\nu} + B_{\nu}T \tag{7}$$

Para descrever soluções ternárias ou de mais alta ordem com base em dados de sistemas binários, um critério precisa ser estabelecido para prever e representar as propriedades das fases de mais alta ordem em função das de ordem mais baixa. Os diversos métodos empíricos empregados para este fim foram revistos por Hillert [13], sendo o modelo de Muggianu o mais comumente empregado.

#### 2.2 Estudo dos modelos de solução e sua descrição matemática

A segunda área importante para a termodinâmica computacional é a busca e a definição dos modelos físico-químicos mais adequados à descrição de soluções reais. Apesar da formulação matemática destes modelos estar relativamente bem estabelecida, duas áreas de pesquisa persistem:

- definição dos modelos mais adequados a determinadas famílias de materiais, tais como soluções de óxidos a alta temperatura e soluções aquosas e,
- estabelecimento da equivalência e das relações de conversão entre os diversos modelos, de modo a minimizar os esforços de avaliação, tabulação e manipulação de dados de soluções.

# 2.3 Minimização de energia Livre

A última área é determinação da condição de equilíbrio através da minimização da energia livre de Gibbs do sistema com todas as suas fases e compostos. Diversos métodos computacionais e programas foram desenvolvidos. Os programas como ThermoCalc [14], ChemSage ou FACT [15], entre outros, são capazes de tratar sistemas multicomponente e multi-fase com relativa facilidade, convergindo para a solução de equilíbrio do sistema com bastante consistência.

# 3. Modelos de Solução para as fases presentes em aços IF

# 3.1 Elementos Puros e compostos estequiométricos

No presente trabalho foram empregadas as descrições adotadas no banco de dados "Thermo-Calc Steels 2000"[16]. Os elementos puros e compostos

estequiométricos foram descritos conforme expressões da forma da equação 4, obtidas dos bancos de dados para elementos puros [4] ou para substâncias puras desenvolvido pelo SGTE ("Scientific Group Thermodat Europe"). As propriedades das substâncias, tais como, por exemplo, os compostos  $Ti_4C_2S_2$  e  $Ti_2N$  podem ser expressas como:  $G_{AxByCz}=xG_A+yG_B+zG_C+A+BT$ .

#### 3.2 Soluções e fases não estequiométricas

As fases CCC, CFC assim como os carbonitretos foram modelados segundo o modelo de solução sub-regular com sub-redes, desenvolvido por Hillert e Staffansson [17], que permite descrever soluções sólidas intersticiais e compostos (intermetálicos) ordenados com alguma variação da estequiometria.

Hillert propôs que, em determinadas soluções, a mistura entre as espécies presentes não ocorre de forma irrestrita, como no caso de uma solução substitucional, mas somente nas sub-redes em que a espécie está presente. Logo, para um composto com quatro elementos presentes em duas sub-redes distintas, fórmula geral  $(A,B)_p(C,D)_q$ , a fração de cada elemento na sua própria sub-rede é:

$$y_A = \frac{n_A}{n_A + n_B}; y_A + y_B = 1$$
 e  $y_C = \frac{n_C}{n_C + n_D}; y_C + y_D = 1$ , (8)

onde n<sub>i</sub> é a fração molar do elemento i. A entropia configuracional deste composto:

$$-\frac{S_m}{R} = a(y_A \ln y_A + y_B \ln y_B) + b(y_C \ln y_C + y_D \ln y_D)$$
(9)

A energia livre deste composto  $(A,B)_p(C,D)_q$  é expressa com relação a um estado de referência definidos por compostos reais, ou hipotéticos,  $A_aC_c$ ,  $A_aD_c$ ,  $B_aC_c$  e  $B_aD_c$ ::

$$G_{m}^{\varphi} = y_{A}y_{C}^{o}G_{A_{p}C_{q}} + y_{A}y_{D}^{o}G_{A_{p}D_{q}} + y_{B}y_{C}^{o}G_{B_{p}C_{q}} + y_{B}y_{D}^{o}G_{B_{p}D_{q}} + RT\Delta S_{m}^{ideal} + \Delta G_{m}^{xc}$$
(10)

O termo referente à entropia segue a equação (9) e o termo que descreve a energia de excesso é, em geral descrito por um polinômio de Redlich-Kister.

As expressões das energias livres e energias de excesso foram ajustados por vários autores [16,18,19]. Este trabalho adota a descrição de Sundman [16].

#### 4. Exemplos de Aplicação

De Ardo e colaboradores [20] chamaram a atenção em uma série de trabalhos experimentais para a ocorrência de precipitados particulares aos aços IF, como, por exemplo,  $Ti_4C_2S_2$ . Estes autores discutiram, qualitativamente, as diferenças entre os processos de precipitação em acos ARBL microligados e acos IF. A Figura 1 apresenta um mapa esquemático proposto por Hua et al. [20] para descrever o processo de precipitação e estabilização dos carbonitretos em aços IF. Em particular, experiências foram realizadas com dois aços, um estabilizado somente com Ti e o outro com Ti e Nb (Tabela 1). Hua et al. empregaram uma següência de tratamentos térmicos com austenitização a 1300°C e tratamentos isotérmicos a 1220, 1150 e 930°C, e estudaram a següência de precipitação, propondo mapas de precipitação em função da concentração de Ti e C. A Figura 2 apresenta um mapa de precipitação para a composição do aço marcados como B na Figura 1 e identificados como Hua-Ti, na Tabela 1. Este mapa permite avaliar o efeito de variações de composição e a extensão da dissolução do carbono e titânio durante um enfornamento hipotético a temperatura indicada. Todos os cálculos realizados são para condições de equilíbrio e nenhum aspecto cinético foi considerado. A Figura 3 apresenta a evolução da precipitação no aço Hua-Ti (Tabela 1). Convém observar que à temperatura de enfornamento de placas, ainda existe sulfeto complexo e composto rico em titânio (identificado como Ti(CN)) não dissolvido. A proporção que o aço é resfriado, a quantidade destas fases aumenta, removendo

carbono, nitrogênio e enxofre de solução. Há uma transição drástica de solubilidade na transformação  $\gamma \rightarrow \alpha$  e, em condições de equilíbrio, ocorreria uma mudança do sulfeto misto para (MnFeTi)S a temperaturas mais baixas. É pouco provável que esta transformação de sulfetos efetivamente ocorra durante o resfriamento póslaminação a quente ou mesmo no curto espaço de tempo do recozimento contínuo. A Figura 4 mostra a evolução das frações de C e N no composto rico em titânio, Ti(CN). A temperaturas elevadas, o Ti forma um nitreto e a medida que a temperatura é reduzida ocorre a precipitação do carbonitreto, com uma alteração da proporção dos dois elementos no Ti(C,N).

A Figura 5 apresenta análise semelhante para o resfriamento do aço identificado como Hua Ti+Nb na Tabela 1. Observa-se que a extensão de precipitação do carbosulfeto de Ti e de outros sulfetos, (MnFeTi)S, é maior neste caso. A fixação de parte do carbono pelo nióbio permite que mais titânio esteja disponível para precipitação nestes sulfetos.

É interessante observar que os cálculos permitem prever qual a quantidade de Nb em solução em um aço Ti+Nb como discutido na Figura 5. Esta informação é crítica se a adição de nióbio é feita visando afetar a recristalização e a formação de textura, fenômenos aparentemente associados a presença de Nb em solução.

Kojima et al. [21], estudaram diferentes composições de aços IF visando tornálos endurecíveis em tratamento térmico ("*bake-hardenable*"). Uma das teorias mais aceitas estabelece que a obtenção de aço bake-hardenable depende da presença de carbono ou nitrogênio em solução para causar envelhecimento durante o tratamento de *bake-hardening* [22]. Assim, importa conhecer o teor de carbono disponível para ficar em solução na ferrita, ou ligado a precipitados de baixa estabilidade relativa, como, por exemplo, cementita. Kojima et al. identificaram os aços C e E, da Tabela 1, como os mais adequados para o tratamento de *bakehardening*. A Figura 6 mostra que, efetivamente, estas composições resultam em maior teor de carbono em solução, favorecendo o tratamento de *bake-hardening*. Além disto, é possível identificar quais os compostos mais efetivos na eliminação do carbono em solução, quando desejado.

#### 5. Conclusões

Exemplos práticos de aplicação de termodinâmica computacional mostram claramente a possibilidade de avaliar o efeito de diferentes composições de aciaria sobre a quantidade de cada elemento em solução ou precipitado, bem como os tipos de precipitados. A combinação destes dois conhecimentos pode ser uma ferramenta eficiente para encurtar o tempo e reduzir os custos de desenvolvimento, projeto de composição (*"alloy design"*) de aços IF com propriedades cada vez mais adequadas às aplicações da indústria de conformação.

Naturalmente, a incorporação de modelos cinéticos a este ferramental permitirá encurtar, ainda mais, o tempo e os custos deste desenvolvimento, na medida que os efeitos dos tratamentos termomecânicos e do recozimento contínuo poderão ser mais bem apreciados.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio de CNPq, CAPES e FAPERJ a suas pesquisas, que permitiram a realização deste trabalho. ACS agradece o apoio do IBQN e proveitosas discussões com engenheiros da CST e da CSN.

## Bibliografia

- [1] RENNÓ, R. T., Monteiro, B. O., Novaes, C. A. L. e COSTA E SILVA, A. L. V. (1999). 54o Congresso Anual da ABM, São Paulo, SP, ABM São Paulo SP CD-ROM p 480-485.
- [2] GIBBS, J. W. (1962). The Scientific Papers of J. Willard Gibbs, Volume 1, Thermodynamics. New York, Dover Publications.
- [3] KUBASCHEWSKI, O., EVANS, E. L. e ALCOCK, C. B. (1967). <u>Metallurgical</u> <u>Thermochemistry</u>. Oxford, Pergamon Press.
- [4] DINSDALE, A. T. (1991). CALPHAD **15**(4): 317-425.
- [5] INDEN, G, Physica 103B, 82-100 (1981).
- [6] HILLERT, M. e JARL, M. (1978). CALPHAD 2 (3): 227-238.
- [7] DeHOFF, R. T. (1993). <u>Thermodynamics in Materials Science</u>. New York, McGraw-Hill, Inc.
- [8] HILDEBRAND, J. H. (1929). Journal of the American Chemical Society 51: 66.
- [9] GUGGENHEIM, E. A. (1952). <u>Mixtures</u>. Oxford, Clarendon Press.
- [10] LUPIS, C. H. P. (1983). <u>Chemical Thermodynamics of Materials</u>. New York, North-Holland.
- [11] SUNDMAN, B. e AGREN, J. (1981). Journal of Physical Chemistry of Solids **42**: 297-301.
- [12] SOMMER, F, Z. Metallkde. 73, 72-76 (1982).
- [13] REDLICH, O. e KISTER, A. T. (1948). Ind. Eng. Chem. 40 (2): 345-348.
- [13] HILLERT, M. (1980). CALPHAD 4 (1): 1-12.
- [14] SUNDMAN, B., JANSSON, B. e ANDERSSON, J. O. (1985). CALPHAD 9: 153-190.
- [15] PELTON, A. D., <u>Ber. Bunsenges. Phys. Chem</u>. 87, 183-188 (1983).
- [16] SUNDMAN, B. (1999). TCFE2000- Database. Stockholm, Sweden, KTH.
- [17] HILLERT, M. e STAFFANSSON, L.-I. (1970). <u>Acta Chemica Scandinavica</u> 24: 3618-3626.
- [18] AKAMATSU, S., SENUMA, T. e HASABE, M. (1993). International symposium on low carbon steels for the 90's, TMS-AIME, Warrendale, PA.
- [19] SAUNDERS, N. (1997). <u>FEDATA- Database</u>. Stockholm, Sweden, KTH-Thermotech.
- [20] HUA, M., GARCIA, C. I. e DeARDO, A. J. (1997). <u>Met. and Mat. Trans. A</u> **28A**(September 1997): 1769-1780.
- [21] KOJIMA, N., MIZUI, N. e TANIOKU, T. (1993). <u>Sumitomo Search, Sumitomo</u> <u>Metals</u> **45**(5): 12-19.
- [22] HANAI, S. T., NAGAYASU; TOKUNAGA, Y., MIZUYAMA, Y. (1984). <u>Transactions ISIJ</u> 24: 17-23.

Aço	С	Ν	S	Ti	Nb	Mn
Hua Nb+Ti	0,0026	0,003	0,006	0,06	0,003	0,11
Hua Ti	0,0026	0,003	0,004	0,075	-	0,14
Kojima A	0,0020	0,0025	0,006	0,06	-	0,3
Kojima B	0,0020	0,0025	0,006	0,02	-	0,3
Kojima C	0,0020	0,0025	0,006	0,01	-	0,3
Kojima E	0,0020	0,0025	0,006	0,01	-	1,4

Tabela 1: Composição química dos aços citados neste trabalho (% em peso)



Figura 1 Mapa qualitativo de precipitação proposto por Huang et al. [20], para aços IF contendo S e Ti (Ti<sup>\*</sup>=Ti <sub>total</sub>-3,42N). H é fase  $Ti_4C_2S_2$ . O ponto A indica a composição do aço Hua Ti+Nb e o ponto B, indica o aço Hua Ti (Tabela 1).



Figura 2 Mapa de precipitação calculado para o aços IF ao Ti como o aço identificado como Hua-Ti (Tabela 1) a 1300 °C.



Figura 3. Quantidade de precipitados (equilíbrio) ao longo do resfriamento desde a temperatura de enfornamento de placa para o aço Hua-Ti (Tabela 1).



Figura 4. Cálculo da evolução da composição dos carbonitretos presentes no aço Hua-Ti (Tabela 1).



Figura 5. Quantidade de precipitados (equilíbrio) ao longo do resfriamento desde a temperatura de enfornamento de placa para o aço Hua-Ti+Nb (Tabela 1).



Figura 6. Teor de carbono em solução na ferrita para os aços "bake-hardening" estudados por Kojima [21]. Observa-se a variação da quantidade de carbono disponível para endurecimento da ferrita em função da composição química.

# COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS EVALUATION OF THE PRECIPITATION IN LOW CARBON AND INTERSTITIAL FREE STEELS<sup>4</sup>

André Luiz Vasconcelos da Costa e Silva<sup>5</sup> Roberto Ribeiro de Avillez<sup>6</sup>

#### Abstract

The different models employed to describe the thermodynamics behavior of iron based systems with important compound precipitations were described in a previous work. These models are now applied to relevant technological conditions for the processing of low carbon steels and interstitial free (IF) steels. It is devoted a special attention to C, N, S, Ti and Nb, the effect of these elements on the precipitation sequence and the amount left in solution. It is further discussed the possibilities and the restrictions of the computational thermodynamics on the alloy design of steels.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Contribuição apresentada no 56° Congresso da ABM, 16 a 20 de julho de 2001, Belo Horizonte, MG.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Engenheiro Metalúrgico, Membro da ABM, PhD, Diretor Técnico do Instituto Brasileiro da Qualidade Nuclear e Professor da EEIMVR-UFF, Av. Gen Justo 365, 4° andar, 20021-130 Rio de Janeiro, RJ; andrecs@ibqn.com.br

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Engenheiro Metalúrgico, Membro da ABM, PhD, Professor Associado; Pontifícia Universidade Católica, Rua Marques de São Vicente, 225-DCMM, 22453-900 Rio de Janeiro, RJ; avillez@dcmm.puc-rio.br.