

Aplicación del Software Thermo-Calc y Dictra en el Diseño de Tratamientos Térmicos de Acero

SAUCEDO, Maribel L*†, SORIANO, Tania, SERRANO, Eumir, AVILA, Erika

Recibido Abril 05, 2016; Aceptado Octubre 04, 2016

Resumen

Los programas Thermo-Calc y Dictra se utilizaron para diseñar el tratamiento térmico de homogeneización de un acero inoxidable martensítico AISI 420 en estado de colada. Los resultados de simulación indicaron que la temperatura adecuada es 1040°C por un tiempo de 4×10^4 s. Así mismo, con el módulo Scheil se obtuvieron las fases presentes de no equilibrio que se formaron durante la solidificación para este acero, α + dos tipos de carburos. Lo anterior confirmó lo observado por microscopía óptica y microscopía electrónica de barrido para las muestras de colada. También se verificó experimentalmente que el tratamiento de homogeneización destruyó la estructura de colada del acero, uniformizando la composición química y dureza del material.

Aceros, Homogeneización, Thermo-Calc.

Abstract

Thermo-Calc and Dictra softwares were used to design the homogenizing heat treatment of the as-cast martensitic stainless steel AISI 420. Simulation results indicated that the suitable homogenizing temperature and time were 1040°C and 4×10^4 s, respectively. Likewise, the no equilibrium phases, ferrite and two carbides, of the as-cast steel were determined using the Scheil module of Thermo-Calc which was confirmed experimentally with the SEM observation of the as-cast steel. The observation of homogenized steel also verified that the as-cast microstructure was destroyed obtaining a uniform chemical composition and hardness of material.

Steels; Homogenizing, Thermo-Calc.

Citación: SAUCEDO, Maribel L., SORIANO, Tania, SERRANO, Eumir, AVILA, Erika. Aplicación del Software Thermo-Calc y Dictra en el Diseño de Tratamientos Térmicos de Acero. Revista Tecnología e Innovación 2016. 3-9 : 28-36

*Correspondencia al Autor (Correo Electrónico: orisavila77@yahoo.com)

† Investigador contribuyendo como primer autor.

Introducción

Los aceros inoxidable martensíticos son aleaciones que contienen elementos aleantes como cromo, carbono, molibdeno y manganeso, los que les confieren propiedades mecánicas específicas de acuerdo al contenido de los mismos mejorando su desempeño dependiendo de la aplicación para la cual fueron fabricados. Estas aleaciones se utilizan ampliamente en la industria automotriz y metal-mecánica.

Este acero se obtiene por procesos de fusión y vaciado, la microestructura que se obtiene de colada es dendrítica y presenta microsegregación. Por lo que tienen propiedades mecánicas no homogéneas provocando la disminución de las mismas.

Por lo tanto es necesario realizar un tratamiento térmico de recocido de homogeneización para uniformizar la microestructura, mejorando las propiedades mecánicas y preparar el material para tratamientos térmicos posteriores. Para el diseño del tratamiento térmico se utilizan diagramas de equilibrio los cuales hoy en día pueden calcularse por medio de software de simulación para disminuir el costo y tiempo de experimentación.

Thermo-Calc y Dictra son dos de los programas que hoy en día se utilizan para la simulación de diagramas de fase binarios, ternarios y para sistemas de multicomponentes así como para determinar el tiempo de tratamiento térmico en una aleación.

Por lo anterior, el objetivo principal de este trabajo es estudiar el acero AISI 420 en estado de colada y después de un recocido de homogeneización, mediante la simulación numérica, usando los programas de simulación Thermo-Calc y Dictra.

Así como en forma experimental mediante la caracterización microestructural y mecánica de los aceros homogeneizados para obtener aceros con mejores propiedades mecánicas.

Métología Numérica

Thermo-Calc es un software flexible para todos los tipos de cálculos de propiedades termodinámicas, incorpora una interfaz de línea de comandos (Console Mode) así como un interfaz gráfica moderna (Graphical Mode), donde se puede escoger libremente el modo de operación que sea el más apropiado para lo que se desea realizar.

Existen módulos especiales para cálculos específicos, como la simulación de Scheil-Gulliver para la solidificación de aleaciones, cálculos de diagramas de Pourbaix, etc.

Los cálculos de Thermo-Calc están basados en una base de datos termodinámica de alta calidad desarrollada por evaluaciones críticas y sistemáticas de diversos datos experimentales y de información teórica.

El programa Thermo-Calc consta de una serie de módulos especiales y sub-módulos. Una interfaz de programación utiliza una rutina estructurada que está vinculada con varios módulos especiales para la inicialización del sistema, definiciones del sistema, manipulaciones de datos, realización de cálculos y tratamiento de resultados; y a través de una interfaz de programación una puede construir otros módulos especiales (los cuales son similares a los existentes en los módulos especiales) para cierto tipo de cálculos/simulaciones.

El módulo TDB permite seleccionar la base de datos correcta y la definición de un sistema químico y lee de la base de datos al área de datos global. El módulo GES permite acceder a los modelos de forma interactiva y escribir o modificar datos. El módulo POLY permite establecer las condiciones de presión-temperatura-composición y realizar el cálculo de diagramas equilibrio y de fase. El módulo POST puede calcular varios diagramas de equilibrio y diagramas de propiedades que resultan de cálculos de equilibrio. El módulo TAB permite la tabulación de propiedades termoquímicas para sustancias o reacciones químicas bajo ciertas condiciones.

El módulo PARROT puede ajustar parámetros termodinámicos disponibles de los datos experimentales. El módulo ED-EXP puede ayudar a editar puntos de datos experimentales con el fin de hacer una optimización de confianza. El módulo SYS se usa para interacciones con varios sistemas de operación y para la creación y ejecución de archivos macro.

La figura 1 muestra la forma en que los módulos están interconectados y como trabajan entre si.

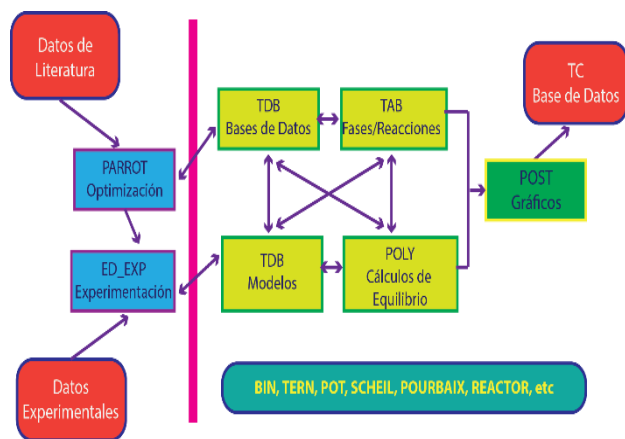


Figura 1 Interacción de los módulos de Thermo-Calc para el desarrollo de las simulaciones.

DICTRA que por sus siglas en inglés significa **D**iffusion **C**ontrolled **T**RANSformations es un software único para la simulación de transformaciones controladas por difusión en aleaciones de multicomponentes. El programa DICTRA se basa en una solución numérica de las ecuaciones de difusión para multicomponentes.

En el desarrollo de DICTRA, se ha puesto énfasis en vincular los métodos fundamentales a los datos termodinámicos y cinéticos evaluados críticamente, permitiendo que se lleven a cabo simulaciones en condiciones reales en aleaciones de importancia.

Las simulaciones son en una dimensión y pueden utilizarse tres geometrías diferentes, cilíndrica, esférica y plana. La geometría cilíndrica puede utilizarse por ejemplo para la modelación de difusión a través de la pared de un tubo, así como en la disolución de precipitados en forma circular.

Algunos ejemplos de las aplicaciones del programa DICTRA es en la homogeneización de aleaciones, carbonización y descarburización de aceros, nitrocarburoización de aceros, microsegregación durante la solidificación, engrosamiento de precipitados, etc. Como se puede observar en la figura 2 DICTRA está interconectado con Thermo-Calc, el cual realiza todos los cálculos termodinámicos necesarios. La simulación de difusión está basada en la evaluación de datos cinéticos y termodinámicos, los cuales han sido almacenados en una base de datos.

DICTRA utiliza datos termodinámicos como la energía libre de Gibbs que obtiene del Thermo-Calc y una base de datos de movilidad y difusividad para resolver la ecuación de la primera ley de Fick, pero es necesario establecer condiciones de frontera externa e interna.

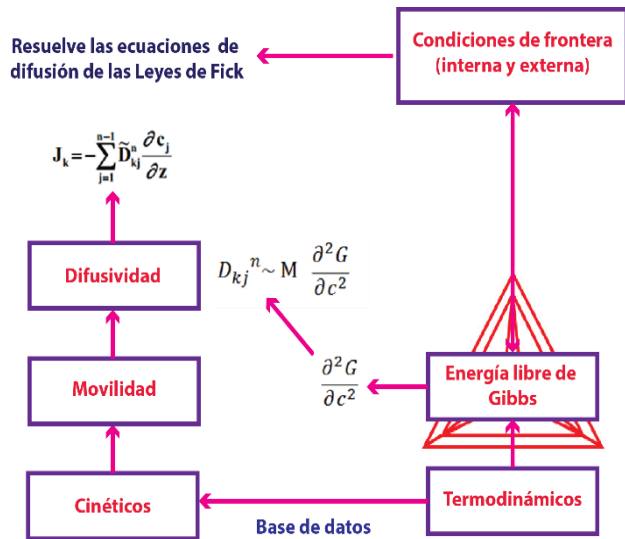


Figura 2 Procedimiento básico que lleva a cabo DICTRA para realizar los cálculos de difusión.

Una de las ventajas del programa DICTRA es que maneja coeficientes de difusión para multicomponentes, por lo tanto se usa la ecuación de Onsager, Ec. (1) en la cual podemos hacer la difusión para sistemas de multicomponentes. Onsager postuló que cada flujo termodinámico se relaciona linealmente con toda fuerza termodinámica, por lo tanto, en la dirección z para un sistema isobárico isotérmico tenemos:

$$J_k = - \sum_{i=1}^n L'_{ki} \frac{\partial \mu_i}{\partial z} \quad (1),$$

μ_i = potencial químico para varias especies y se puede suponer que son funciones únicas de la composición. Ejemplo: $\mu_i = f(c_1, c_2, c_3, \dots, c_n)$

L'_{ki} = factor de proporcionalidad el cual depende de la movilidad de las especies individuales.

Generalmente, es más conveniente expresar los flujos en función de gradientes de concentración en lugar de gradientes de potencial químico, para que DICTRA posteriormente convierta las difusividades en movilidades atómicas almacenando estos datos en el programa y realizar los cálculos de simulación para multicomponentes.

$$D_{kj} = - \sum_{i=1}^n L'_{ki} \frac{\partial \mu_i}{\partial c_j} \quad (2).$$

Los valores de $\frac{\partial \mu_i}{\partial c_j}$ con cantidades puramente termodinámicas, algunas veces se refieren a factores termodinámicos.

La razón para almacenar las movilidades individuales en la base de datos, en lugar de los coeficientes de interdifusión es que en un sistema de n -componentes, hay $n-1$ movilidades y $(n-1)^2$ coeficientes de interdifusión.

Por lo tanto, para sistemas con más de dos componentes, hay menos movilidades que difusividades que necesitan ser almacenadas. El coeficiente de interdifusión siempre puede calcularse de las movilidades si se conocen los elementos termodinámicos.

$$L'_{kj} = \sum_{i=1}^n (\delta_{ik} - c_k V_i) c_i y_{va} M_i \quad (3),$$

dónde δ_{ik} es delta Kronecker; por ejemplo, $\delta_{ik} = 1$ cuando $j=k$ y de otra manera $\delta_{ik} = 0$. Los términos c_k y c_i son las cantidades de i y k por unidad de volumen, V_i es el volumen molar parcial del elemento i , y y_{va} es la fracción de sitios vacantes en la red en la subred donde i se disuelve. El término M_i es la movilidad de i cuando i es intersticial y la movilidad dividida por y_{va} cuando i se disuelve substitutionalmente. Ver apéndice A.

Las bases de datos termodinámicos son las mismas que se usan en el programa Thermo-Calc. Las bases de datos de movilidad se crean a través de un procedimiento de evaluación similar al de las bases de datos termodinámicos. Los datos experimentales se obtienen y seleccionan de la literatura.

DICTRA contiene un módulo para la optimización de información de movilidad, PARROT. Este módulo permite al usuario ampliar las bases de datos de movilidad existentes, así como crear sus propias bases de datos.

DICTRA se divide en 4 módulos:

- Solución de ecuaciones de difusión
- Cálculo del equilibrio termodinámico
- Solución de ecuaciones de balance-flujo
- Desplazamiento de las posiciones de la fase de la interfaz y el ajuste de los puntos del mallado.

Además hay un post procesador que permite al usuario graficar y obtener los datos de los cálculos de la simulación, por ejemplo perfiles de concentración, tamaños de partícula en función del tiempo, y también un módulo de base de datos para el manejo de datos cinéticos y termodinámicos.

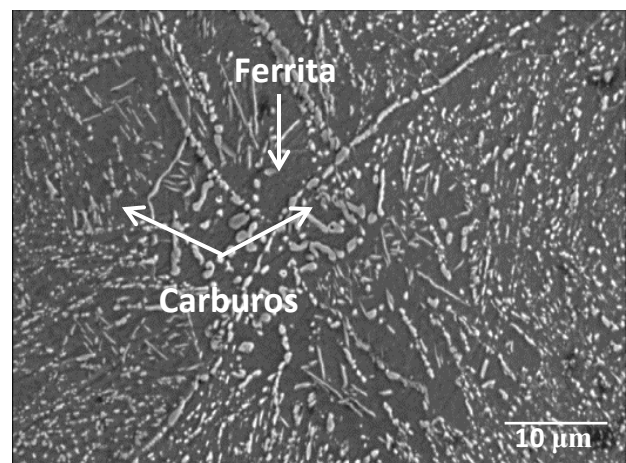
Metodología Experimental

Las piezas de estudio son unas pinzas de punta de electricista de un acero inoxidable AISI 420 en estado de colada, las muestras se cortaron y montaron para su preparación metalográfica. La composición química consiste de 0.32 %C, 13.41 % Cr, 0.81 % Mn, 0.63 % Si, 0.17 % Mo y 0.36 %Ni.

El acero se desbastó con papel abrasivo de carburo de silicio hasta el grado 1500 y posteriormente se pulió con alúmina de 0.05 micras y finalmente se atacó con el reactivo Villela. Se tomaron fotografías por microscopia óptica y microscopia electrónica de barrido en estado de colada y después del tratamiento térmico, así mismo, se realizó la prueba de dureza.

Resultados y Discusión

Para el acero AISI 420 en la figura 3 (a) se presenta el diagrama de Scheil, temperatura vs. fracción mol del sólido formado, calculado con el programa de simulación Thermo-Calc. La primera fase que solidifica es la ferrita, BCC_A2 y después se forman dos tipos de carburo de cromo, M7C3 y el FCCA1#1. Lo anterior se comprobó con micrografías obtenidas por la técnica de microscopia electrónica de barrido las cuales se presentan en la figura 3 (b), donde se confirma la presencia de la matriz ferrítica y una gran cantidad de carburos. La mezcla de fases provoca la disminución en las propiedades mecánicas de este componente.



(b)

Figura 3 (a) Diagrama de Scheil y (b) microestructura obtenida por microscopia electrónica de barrido para el acero AISI 420.

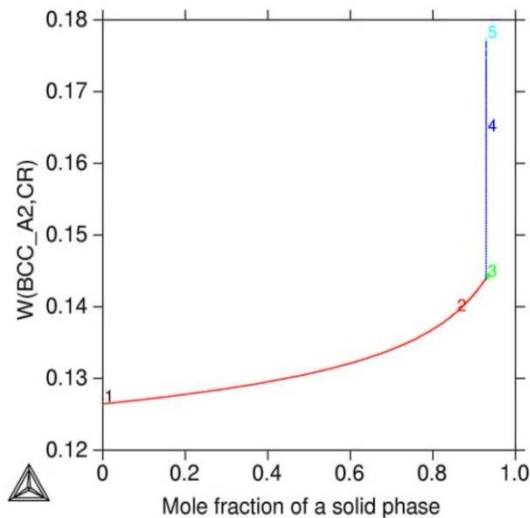
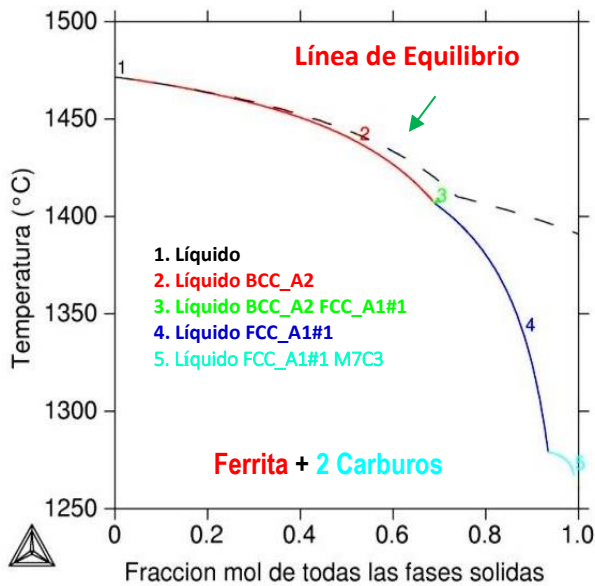


Figura 4 Diagrama de microsegregación del cromo para el acero AISI 420.

En la figura 4 se observa el diagrama de microsegregación del elemento cromo y se aprecia como es la distribución del cromo en la ferrita, la primera ferrita que se forma tiene un porcentaje de cromo de aproximadamente 13% aproximadamente y conforme aumenta la solidificación el contenido de cromo en ferrita aumenta hasta llegar a la región interdendrítica en donde el contenido es de 18% aproximadamente.

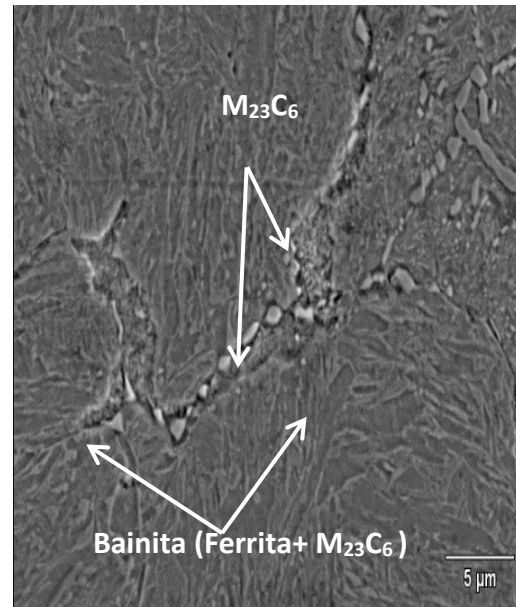
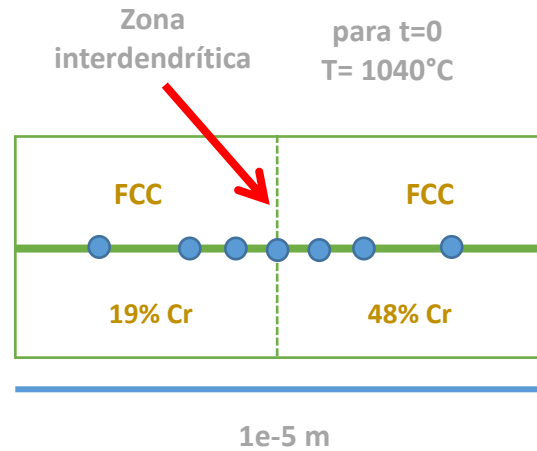


Figura 5 (a) Diagrama pseudobinario Fe-C y (b) microestructura de un acero AISI 420 homogeneizado.

En la figura 5(a) se presenta el diagrama de equilibrio pseudobinario calculado para el acero AISI 420. De acuerdo al porcentaje de carbono de este acero que es de 0.32%, se observa que la temperatura adecuada para realizar el tratamiento térmico es de 1040 °C ya que a esa temperatura se tiene una completa austenización. Esto concuerda con la temperatura reportada en la literatura para este acero. Las fases presentes. En equilibrio que se forman después del tratamiento de recocido son ferrita y carburos M₂₃C₆.

Esto se confirmó con las micrografías obtenidas con la técnica de microscopía electrónica de barrido, figura 5 (b), donde se aprecia la formación de agujas de bainita así como la presencia de carburos en los límites de grano. Es importante señalar que estos diagramas pseudobinarios calculados con Thermo-Calc representan una forma confiable para determinar la temperatura de tratamiento térmico en aleaciones con multicomponentes.

En la figura 6 (a) se aprecian las condiciones iniciales para la simulación del acero AISI 420, se establecieron zonas pobres en cromo de 12% aproximadamente y zonas ricas de 18% aproximadamente y una distancia interdendrítica de $1 \times 10^{-5} \text{ m}$ ($10 \mu\text{m}$). La figura 6 (b) muestra el gráfico que se obtiene con el programa DICTRA después de la simulación cada curva corresponde a un tiempo de tratamiento térmico establecido al introducir todas las condiciones iniciales para realizar la simulación, conforme va aumentando el tiempo la variación en concentración va disminuyendo hasta llegar a la homogeneización del material. En la figura 7 (b) se observa la variación en concentración de cromo que se tomó para el cálculo, la concentración fue de 19-48% aproximadamente en porcentaje peso y una distancia de $1 \times 10^{-5} \text{ m}$ ($10 \mu\text{m}$). Por lo tanto, para 1040°C el tiempo que tarda en homogeneizarse la aleación es de $7 \times 10^4 \text{ s}$ (19 h).



La figura 7 presenta la microestructura obtenida por microscopía óptica del acero AISI 420, la cual se obtuvo después del tratamiento térmico de recocido de homogeneización, se observa que para el acero la microestructura se homogeneizó

Para el acero inoxidable AISI 420 se obtuvo una microestructura de Ferrita + Carburos del tipo $M_{23}C_6$, como se espera en un acero inoxidable de este tipo.

El hecho de que el diagrama pseudobinario indica que se trata de ferrita y en las micrografías de la figura 7 se muestra que se trata de agujas de bainita no significa que el diagrama pseudobinario calculado sea incorrecto. Esto simplemente se atribuye al hecho de que el programa no determina microconstituyentes. Por lo tanto, para este acero inoxidable la ferrita indica la formación de agujas de bainita lo cual se confirma con la dureza obtenida después del tratamiento térmico la cual fue de 43 HR_C y concuerda con la requerida que es de 45 HR_C, lo anterior indica que el material se homogeneizó y mejoró en sus propiedades mecánicas para posteriormente ser llevado a otro tratamiento térmico para cumplir con el funcionamiento para el cual se manufacturó este componente de acero inoxidable.

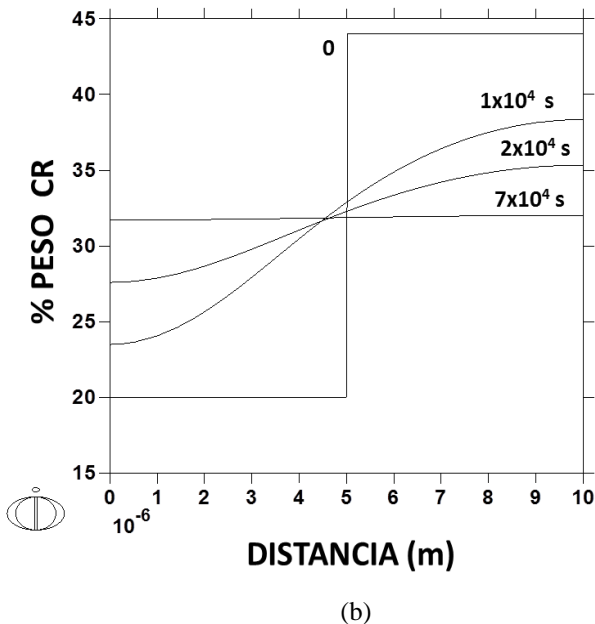


Figura 6 (a) Esquema de la simulación y (b) evolución con el tiempo de la concentración de cromo del acero AISI 420 homogeneizado

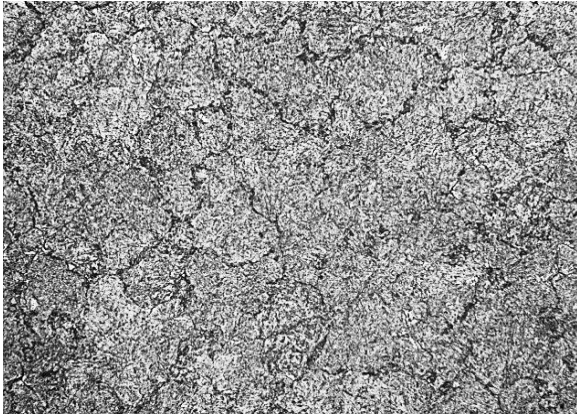


Figura 7 Micrografía del microscopio óptico del acero homogeneizado.

Conclusiones

Con el programa Thermo-Calc se calculó el diagrama pseudobinario para determinar la temperatura de tratamiento térmico, que para el acero AISI 420 fue 1040°C. Con el programa DICTRA se determinó el tiempo de tratamiento térmico utilizando los perfiles de la microsegregación determinados de forma experimental, el cual fue 7×10^4 s (19 h). Las fases presentes en las piezas provenientes de colada se determinaron con los diagramas de Scheil, calculados con el programa Thermo-Calc el acero AISI 420 las fases de Ferrita + Carburos y concuerdan con la caracterización microestructural experimental. Las fases que se formaron después del tratamiento térmico se determinaron con los diagramas pseudobinarios calculados con el programa Thermo-Calc acero AISI 420 las fases de Ferrita + Carburos $M_{23}C_6$ y concuerdan con la caracterización microestructural experimental. Los programas de simulación numérica, Thermo-Calc y DICTRA, son una herramienta importante para calcular diagramas de fase de multicomponentes y para el diseño de tratamientos térmicos, reduciendo tiempo y costo de experimentación.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico de SIP-BEIFI-Instituto Politécnico Nacional (ESIQIE) y Conacyt.

Referencias

Barlow, L. & Toit, M.. (2012). Effect of Austenitizing Heat Treatment on the Microstructure and Hardness of Martensitic Stainless Steel AISI 420. *Journal of Materials Engineering and Performance*. ASM International, Vol. 21, No. 7, pp. 1327-1328.

Wu, K. & Mason, P. (2012). Introduction to Thermo-Calc. Thermo-Calc Software Inc. Calculating Thermodynamic Properties. pp.3-101.

Bramfitt, B. & Benschoter, A. (2002). *Metallographer's Guide. Practices and Procedures for Irons and Steels*. ASM International, pp.4-6.

Andersson, J-O., Helander, T., Höglund, L., Shi P. & Sundman, B. (2002). Thermo-Calc & Dictra, Computational Tools For Materials Science. Thermo-Calc Software. *Calphad*, Vol. 26, No. 2, pp. 273-312.

Prat, O., Garcia, J., Rojas, D., Carrasco, C., & Inden, G., (2010). Investigations on the growth kinetics of Laves phase precipitates in 12% Cr creep-resistant steels: Experimental and DICTRA calculations. *Acta Materialia*, Vol. 58, No. 18, pp.6142–6153.

Garcia, J. & Prat, O. (2011). Experimental investigations and DICTRA simulations on formation of diffusion-controlled fcc-rich surface layers on cemented carbides. *Applied Surface Science*, Vol. 257, No. 21, pp. 8894–8900.

Sozinov, A. & Gavriljuk, V. Estimation of Interaction Energies Me-(C, N) in f.c.c. Iron-Based Alloys using Thermo-Calc Thermodynamic Database. (1999). Scripta Materialia, Vol. 41, No. 6, pp. 679–683.