

Aplicação de cálculo termodinâmico em diagrama de fases para determinação de equilíbrios de fases em superligas à base de Cobalto

Orientador: Maysa Terada

Co-orientador: Alex Matos da Silva Costa

Unidades: Laboratório Nacional de Nanotecnologia – CNPEM

1 INTRODUÇÃO

As ligas à base de Co são conhecidas principalmente pela elevada resistência ao desgaste e pela manutenção da resistência mecânica em temperatura elevada. Isto se deve à combinação de endurecimento por solução sólida da matriz pelas adições de elementos como Cr, W e Mo e pela presença de precipitados dispersos na matriz e nos contornos de grão^[1]. Entretanto, a concorrência com as ligas de Ni e principalmente a descoberta da fase Ni₃Al na liga Nimonic80 impulsionaram o desenvolvimento das ligas de Ni em detrimento às ligas de Co^[2].

A descoberta da fase Co₃(Al,W) em ligas do sistema Co-Al-W^[3] promoveu o aumento do interesse da comunidade científica em relação a este sistema que apresenta microestrutura γ/γ' assim como é observado nas superligas à base de Ni. A diferença neste caso é que a fase ordenada γ' -Co₃(Al,W) está presente em algumas ligas ternárias do sistema Co-Al-W para concentrações de 9 a 10 % at. de Al e de W. Várias ligas baseadas no sistema Co-Al-W vêm sendo alvo de estudos com o objetivo de entender como as adições de elementos de ligas podem afetar a fração volumétrica, a temperatura solvus de γ' , a tensão de escoamento em alta temperatura, sua resistência à oxidação, e os equilíbrios de fases que são estabelecidos em intervalos de temperatura em que estas ligas apresentam potencial de aplicações ($T > 900$ °C)^[3-5].

Com o objetivo de acelerar o desenvolvimento de ligas à base do sistema ternário Co-Al-W e entender como atuam os elementos de liga em relação à estabilidade do equilíbrio de fases γ/γ' , a termodinâmica computacional tem sido uma ferramenta importante neste contexto^[6]. As previsões de equilíbrios de fases bem como as extrapolações obtidas a partir de cálculos de equilíbrios metaestáveis passam pela utilização de programas como *Thermo-Calc*, *Pandat*, *JMatPro*, *MatCalc* entre outros e a seleção de base de dados adequadas para realização dos referidos cálculos. A qualidade dos resultados obtidos está intimamente relacionada com a utilização de uma base de dados bem descrita do ponto de vista de “construção” e qualidade dos dados inseridos na mesma^[7]. Uma base de dados está estruturada com equações de energia livre

de Gibbs de fases que constituem os sistemas binários, ternários, quaternários e sistemas multicomponentes. Na Figura 1 são mostradas algumas extrapolações que foram obtidas a partir do sistema quaternário Co-Ni-Al-W^[5]. Neste trabalho a base de dados foi construída com informações dos sistemas ternários Co-Al-W, Ni-Al-W, Ni-Co-Al, Co-Ni-W e Co-Ni-Al-W.

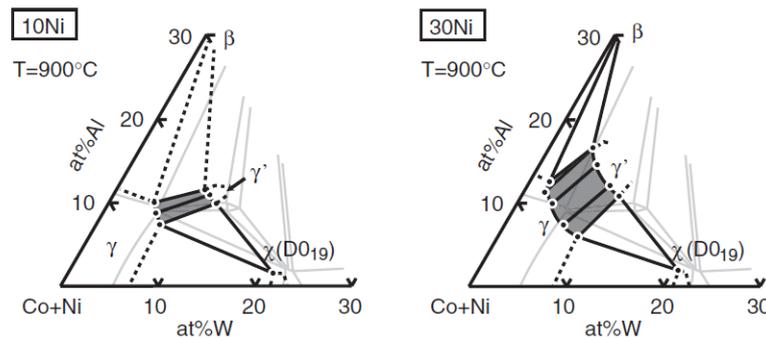


Figura 1. Seções isotérmicas a 900 °C do sistema quaternário Co-Ni-Al-W. Retirado e adaptado de (SHINAGAWA et al., 2008).

2 OBJETIVO

Na presente proposta de pesquisa pretende-se estruturar uma base de dados para ligas à base de cobalto a partir de dados de sistema binários, ternários e multicomponentes ricos em Co. A validação da base de dados será feita comparando os resultados de simulações de cálculo termodinâmico com resultados experimentais obtidos por microscopia eletrônica de varredura e análise térmica (DTA).

3 METODOLOGIA

A realização desta proposta de pesquisa consistirá em uma série de atividades que vão exigir do candidato habilidades como:

- (1) Familiaridade e boa compreensão da língua inglesa bem como de textos científicos;
- (2) Interesse pela área de termodinâmica computacional;
- (3) Interesse por materiais metálicos e em metalurgia física;
- (4) Disposição para realização de atividades multidisciplinares.

Em relação às principais atividades científicas que deverão ser executadas pelo segue abaixo os tópicos mais relevantes a serem considerados:

- 1) Revisão da literatura a respeito dos sistemas binários, terciários, quaternários e multicomponentes baseado em ligas ricas em Co;
- 2) Análise dos dados da literatura, seleção dos dados das informações mais confiáveis em relação aos sistemas estudados e início da estruturação da base de dados;
- 3) Estruturação e verificação da base de dados a partir das informações termodinâmicas das fases presentes nos sistemas estudados;

4) Validação das bases de dados a partir de resultados experimentais.

Esta proposta de pesquisa será coordenada pelo membro do grupo CPM/LNNano (Caracterização e Processamento de Materiais) Dr. Alex Matos da Silva Costa que possui experiência na área de termodinâmica computacional em cálculo de diagrama de fases. Além disso, o grupo CPM dispõe de toda a infraestrutura necessária para a condução desta proposta tendo computadores dedicados para realização dos cálculos através do programa *Thermo-Calc* (licença válida até 2017). Neste trabalho contaremos também com o apoio dos docentes do Departamento de Engenharia de Materiais da Escola de Engenharia de Lorena (Demar-EEL-USP) Dr. Gilberto Carvalho Coelho e Dr Carlos Angelo Nunes que poderão dar o suporte científico durante a realização deste trabalho de iniciação.

4 CRONOGRAMA

Em relação às principais atividades científicas que deverão ser executadas pelo segue abaixo os tópicos mais relevantes a serem considerados:

Tabela 1. Atividades propostas no projeto de iniciação científica.

Atividades	Período (Trimestres)
Revisão Bibliográfica	1° ao 4°
Treinamento com programa Thermo-Calc	1° ao 4°
Estruturação, simulação de equilíbrios de fases, uso e validação da base de dados com dados experimentais	2° e 3°
Apresentação do relatório e publicações	3° e 4°

5 REFERÊNCIAS

- [1] ANTONY, K. C. Wear-Resistant Cobalt-Base Alloys. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, v. 35, p. 52-60, 1983.
- [2] COBALT DEVELOPMENT INSTITUTE. *Cobalt Facts: Metallurgical Uses*. Guilford, Surrey, UK, 2006. p. 8-22.
- [3] SATO, J. et al. Cobalt-Base High-Temperature Alloys. *Science*, v. 312, p. 90-91, 2006.

- [4] CUI, C. et al. A New Co-Base Superalloy Strengthened by γ' Phase. *Materials Transactions*, v. 47, n. 8, p. 2099-2102, 2006.
- [5] SHINAGAWA, K. et al. Phase Equilibria and Microstructure on γ' Phase in Co-Ni-Al-W System. *Materials Transactions*, v. 49, n.6, p. 1474-1479, 2008.
- [6] SAUNDERS, N. Phase diagram calculations for Ni-based superalloys. In: *SUPERALLOYS 1996*, Warrendale, TMS, 1996, p. 101–110.
- [7] KATTNER, U. R. The thermodynamic modeling of multicomponent phase equilibria. *JOM*, 1997, p. 14-19.