

Selección e implementación de un modelo para el inicio de la transformación perlítica durante el enfriamiento en los aceros con baja aleación.

R. Lobaina Sánchez^{*}, L. Goyos Pérez^{}**

^{*} Centro de Inmunoensayo, Calle 134 s/n y Ave 25, Cubanacán, Municipio Playa, Ciudad Habana, Cuba.

^{**} Instituto Superior Politécnico José A. Echeverría, Calle 127 s/n CUJAE, Marianao 15, Ciudad Habana, Cuba.

E-mail: goyos@mecanica.cujae.edu.cu

(Recibido el 9 de Abril de 2006; aceptado el 22 de Julio de 2006)

Resumen.

Los diagramas Tiempo Temperatura Transformación (TTT) de los aceros son de vital importancia para la industria vinculada a la elaboración de los aceros. El desarrollo alcanzado en la obtención de modelos matemáticos de estas curvas ha permitido acercar al ingeniero investigador de la industria y al estudiante, a la comprensión de las variables influyentes en la transformación austenítica, y el impacto que éstas tienen en la modelación de las curvas. En el presente trabajo se valoran diferentes modelos presentados en la literatura consultada. Como resultado, se muestra un modelo para las curvas de inicio de la transformación perlítica, conociendo la composición de los aceros, el tamaño de grano, el sobreenfriamiento y la energía de activación, que son las variables que determinan las diferentes formas que adoptan las curvas. La implementación del modelo seleccionado, ofrece un acercamiento a la posibilidad de crear un aula virtual utilizando una metodología de cálculo, y una herramienta para continuar avanzando en la dirección de perfeccionar y ampliar las posibilidades del resultado presentado.

Palabras claves: modelos de transformación austenítica, diagramas de transformación isotérmica, diagramas TTT.

1. Introducción.

La ingeniería de materiales ha experimentado un desarrollo vertiginoso en los últimos tiempos gracias al aumento del conocimiento sobre los materiales, sus propiedades y al surgimiento de novedosos conceptos en el logro de propiedades determinadas partiendo de la manipulación de las estructuras cristalinas y atómicas de los diferentes materiales.

Dado que las mediciones de las transformaciones, que se producen en un tratamiento térmico, son bastante laboriosas, es normal que se disponga de un número muy limitado de diagramas experimentales TTT y CCT de los aceros en la industria. Incluso los diagramas experimentales colectados en publicaciones no son una herramienta eficiente, tampoco contienen todas las aleaciones comerciales.

Debido a que los datos experimentales de los diagramas cambian con las condiciones, tales como la composición química y tamaño inicial del grano de austenita, los modelos deben predecir con una precisión razonable. Sin embargo, estos pueden entregar un

resultado erróneo cuando se evalúan fuera de las condiciones en que fueron concebidas. Las metodologías desarrolladas hasta hoy son más aplicable para modelar los diagramas de transformación isotérmica (TTT), que los de enfriamiento continuos (CCT) debido a que las teorías termodinámicas de nucleación y crecimiento han sido obtenidas bajo las condiciones isotérmicas.

Con el propósito de incrementar la eficiencia de las búsquedas, los modelos computacionales de diagramas TTT y CCT plantean la transformación difusional de la austenita. Estos modelos de transformaciones de fase han sido obtenidos por dos vías: (1) el enfoque teórico, basado en la termodinámica clásica y la teoría de nucleación y crecimiento y (2) basados en los primeros y haciendo uso de la regresión experimental de modelos semiempíricos.

Con el desarrollo de modelos que simulan el proceso de transformación isotérmica de la austenita, a través del control de variables conocidas como: composición del acero, tamaño de grano y sobreenfriamiento, ha sido

posible predecir con relativa facilidad la estructura final obtenida en los aceros tratados, y con esta las propiedades. La posibilidad de contar con un modelo predictor, permite además un ahorro considerable de tiempo y de recursos en la industria. El uso de la simulación acerca el proceso de producción a la mesa de trabajo del ingeniero y al pupitre del estudiante propiciando enormes posibilidades a la investigación.

2. Selección del modelo.

Los primeros modelos para la nucleación y crecimiento del grano desarrollados por Zenner-Hilert (1948) y Russell (1968), y posiblemente por grupos de investigadores de Kirkaldy (1973) y Bhadeshia (1982), fueron las bases para el actual modelado de las curvas de inicio de transformación perlítica. (Ver Figura 1)

El grupo de Kirkaldy primeramente propuso un modelo para el cálculo del inicio de la transformación isotérmica de la perlita. Más tarde basados en el supuesto sitio de saturación y asumiendo la teoría de crecimiento de Zenner y Hillert, el grupo de Kirkaldy desarrolló modelos semiempíricos para predecir las curvas de transformación isotérmica de la ferrita, perlita, y bainita para varias fracciones volumétricas.

En contraste, basado en la teoría de Russell para la nucleación y crecimiento, Bhadeshia propuso un modelo semiempírico para predecir el inicio de las curvas de transformaciones difusivas y no difusivas, las cuales reproducían acertadamente la región oscura entre la perlita y la bainita. Este trabajo posteriormente fue enriquecido y extendido por Lee y Bhadeshia, para predecir una gran cantidad de diagramas TTT en diferentes aceros.

En contraste, el modelo semiempírico propuesto por Agren y Enomoto, basado en el modelo de Aaronson y Lee, propone un modelo para la transformación durante la nucleación y el crecimiento, usando las ecuaciones para la difusión [4].

Estudios posteriores indicaron que el modelo de Bhadeshia sobreestima el tiempo de incubación en las bajas y las altas temperaturas, y desestima este tiempo en la región donde la temperatura es intermedia [4]. Este cede terreno debido a que las curvas tienen una forma más cóncavas y en consecuencia son solamente validas, en los casos donde los gráficos adoptan la forma de dos curvas separadas, las de transformaciones perlíticas y bainíticas respectivamente, que aparecen en las altas aleaciones.

El modelo de Enamoto puede reflejar con fidelidad el significado físico del tiempo de incubación y se considera un buen modelo para la construcción de las curvas de transformación, sin embargo al igual que el modelo de Bhadeshia, cuando se aplica a bajas concentraciones de los elementos aleantes se obtienen los peores resultados. Otro elemento importante es que ambos modelos, trabajan con las variaciones de la energía interna (ΔG), elementos poco prácticos tanto para la industria como para el aprendizaje, pues existe una mayor información relacionada con la energía de activación (Q).

El modelo de Pham, basado en el de Kirkaldy, reproduce con mayor fidelidad las curvas de transformación respecto a las curvas obtenidas experimentalmente (ver las figuras 2, 3, 4 y 5) [4].

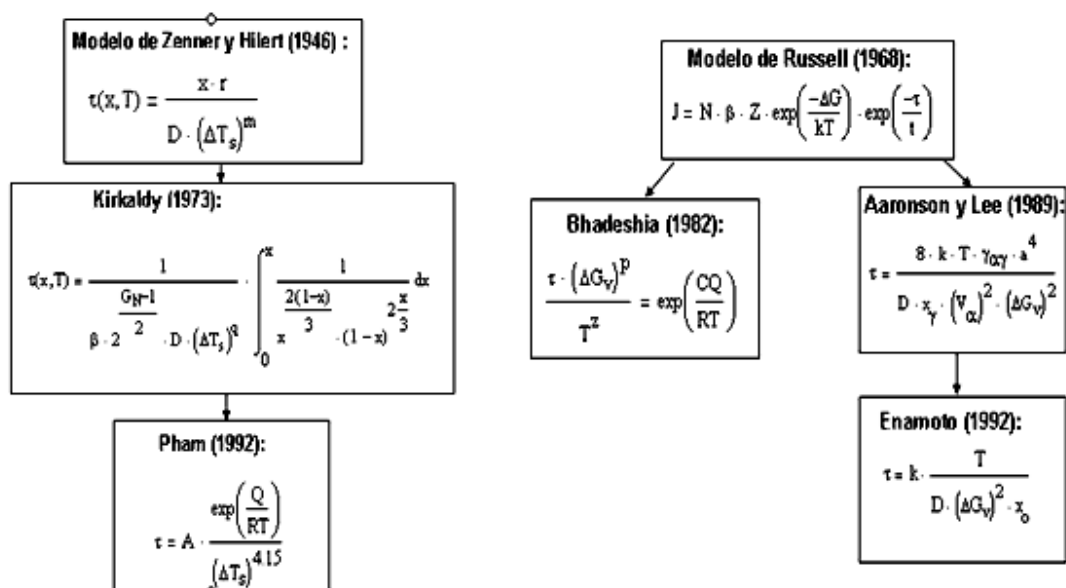


Figura 1. Dos escuelas que desarrollaron la modelación de la nucleación y el crecimiento.

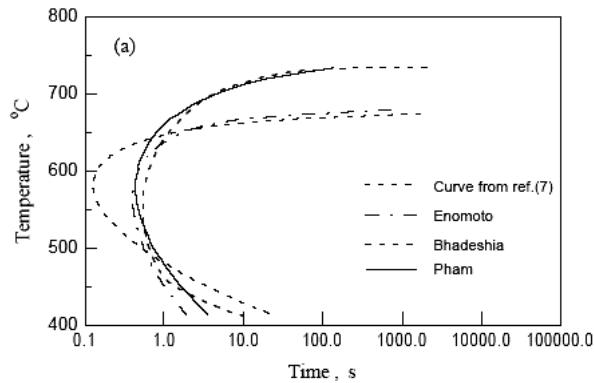


Figura 2: Comparación de los resultados de los diferentes modelos de diagrama TTT para el acero 0.76% C - 0.3% Mn.

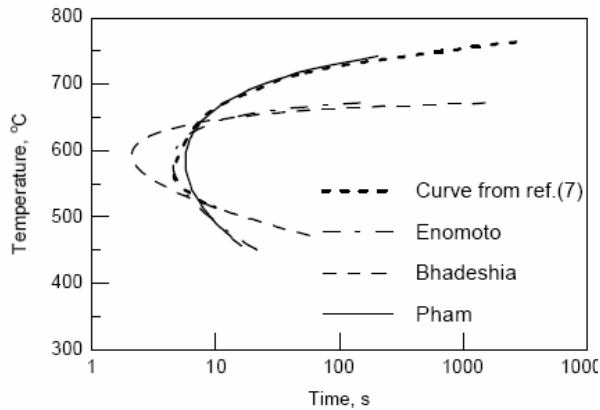


Figura 3: Comparación de los resultados de los diferentes modelos de diagrama TTT para el acero 0.48% C - 2% Mn.

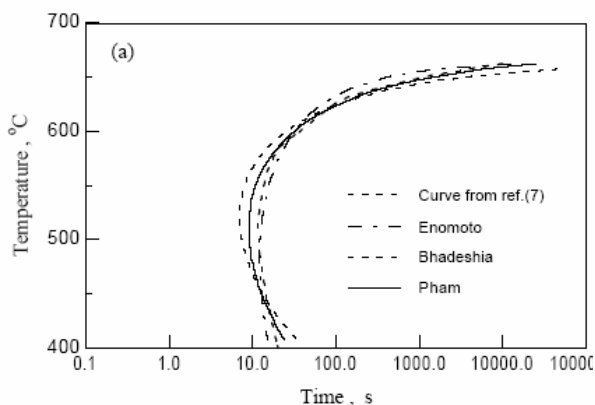


Figura 4: Comparación de los resultados de los diferentes modelos de diagrama TTT para el acero 0.3% C - 3% Ni.

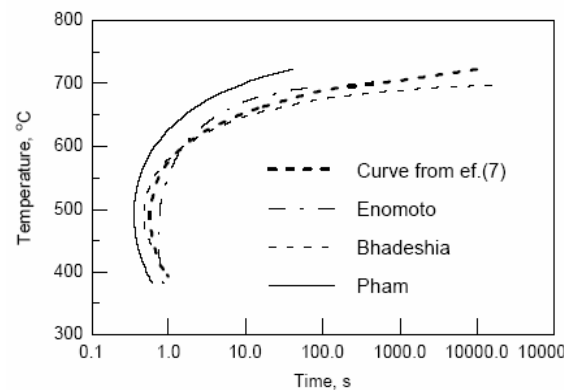


Figura 5: Comparación de los resultados de los diferentes modelos de diagrama TTT para el acero 0.7% C - 1.6% Si.

El modelo de Pham al resumir o simplificar el modelo de Kirkaldy, elimina el termino relacionado con el tamaño de grano (N), factor influyente en el inicio de la transformación, además no define con claridad el término relacionado con la influencia de la fracción transformada, por lo que el modelo original de Kirkaldy presenta mayor generalidad

Sobre el modelo de Kirkaldy, podemos plantear que presenta las variables físicas más familiares como son tamaño de grano (G_n), el sobreenfriamiento (ΔT), a partir de la temperatura de equilibrio y la energía de activación efectiva para que se produzca la difusión (Q_{ef}). Este modelo además plantea o describe de una forma clara el aporte de la fracción transformada (x) a la variable tiempo de transformación (τ).

3. Conclusiones preliminares sobre los modelos.

Después de realizar un análisis de los planteamientos y resultados mostrados en la literatura, podemos enumerar un grupo de conclusiones:

- La escuela de Zenner y Hillert (1946), muestra mejores resultados en la modelación que la de Russell (1968), los modelos de este último ceden terreno al sobrevalorar la nucleación y crecimiento en las zonas bajas y altas de la curva, subvalorando este aspecto en la región intermedia, esto provoca que las curvas sean más cóncavas.
- Utilizando como base el modelo de Zenner y Hillert, Kirkaldy (1973) desarrolló un modelo semiempírico, el cual simplificó Pham (1992) obteniendo en general buenos resultados.
- A pesar de la ventaja que ofrece la simplicidad del modelo de Pham en el mismo se pierde la influencia del

tamaño de grano, por lo que consideramos más conveniente partir del modelo original de Kirkaldy, que es una ecuación más general, la cual permite una mejor comprensión física del estudio de la transformación austenítica al reflejar en sus términos todos los factores influyentes en la transformación austenítica como son: tamaño de grano (G_n), energía de activación efectiva para la difusión (Q_{ef}), diferencia de temperatura entre la temperatura de equilibrio de la nueva fase (Ac_3 ó Ac_1) y temperatura del proceso (ΔT), influencia de la fracción transformada (x) y la influencia que ejercen los elementos de aleación en la difusión.

4. Desarrollo del modelo de Kirkaldy.

Inicialmente el grupo de Kirkaldy presentó un modelo para la ferrita y la perlita [1], partiendo del modelo de Zenner y Hillert [2 y 3], dicho modelo representaba la forma global de las curvas “C”, sin diferenciar las regiones difusivas y no difusivas, presentando una formula semiempírica general del tiempo (τ) para la transformación de una fracción (x) de la austenita a una temperatura dada (T).

$$\tau(x, T) = \frac{1}{\beta \cdot 2^{\frac{N-1}{2}} \cdot Def \cdot (\Delta T)^3} \cdot \int_0^x \frac{1}{x^{\frac{2(1-x)}{3}} \cdot (1-x)^{\frac{2x}{3}}} \cdot dx$$

Donde β es coeficiente empírico, N es el tamaño de grano según ASTM, ΔT es la diferencia de temperatura entre las temperaturas de equilibrio con la nueva fase (Ac_3 , Ac_1 y A_{cm}), (T) la temperatura del proceso y Def es el coeficiente efectivo de difusión. Ellos también asumieron que el coeficiente de difusión efectiva (Def), involucra a los elementos de aleación como una serie de resistencias relacionadas (Ref) como se puede apreciar a continuación:

$$Ref \propto 1 / Def \propto e^{(Q_{ef} / RT)} \sum \alpha_j C_j$$

Donde α_j , es un coeficiente empírico para cada elemento j de aleación, C_j es la concentración para cada elemento j de la aleación y Q_{ef} es la energía de activación efectiva para la difusión quedando [5]:

$$\tau(x, T) = \frac{1}{2^{\frac{N}{8}} \cdot (\Delta T)^3} \cdot e^{\frac{Q_{ef}}{RT}} \cdot \sum_{j=1}^n (\alpha_j \cdot C_j) \cdot \int_0^x \frac{1}{x^{\frac{2(1-x)}{3}} \cdot (1-x)^{\frac{2x}{3}}} \cdot dx$$

El término N asume una incubación transitoria, por tanto, para la nucleación en la superficie de grano, el tiempo del volumen transformado varía desde el tamaño del grano hasta $\frac{1}{4}$ de este (por eso el término $2^{G_n/8}$). Los parámetros críticos de entrada son entonces (1) el tamaño de grano debe ser conocido para cada caso, (2) la temperatura Ac_3 , la cual puede ser calculada termodinámicamente, (3) el coeficiente de difusión efectiva (Q_{ef}), y (4) las constantes empíricas para cada elemento (α_j). “ Q_{ef} ” y “ α_j ” son determinadas empíricamente partir del ajuste de la ecuación anterior para obtener una mejor aproximación a los diagramas TTT experimentales, obteniendo el tiempo de inicio de la transformación perlítica ($\tau(0.1, T)$)[5].

$$\tau(0.1, T) = \frac{e^{\frac{Q_{ef}}{RT}}}{2^{\frac{N}{8}} \cdot (Ac_1 - T)^3} \cdot (60 \cdot \%C + 90 \cdot \%Si + 200 \cdot \%Mo)$$

Modificamos la expresión anterior y colocamos en función de la fracción transformada (x), obtenemos la siguiente expresión:

$$\tau(x, T) = \frac{e^{\frac{Q_{ef}}{R(T+27315)}}}{2^{\frac{N}{8}} \cdot (Ac_1 - T)^3} \cdot (60 \cdot \%C + 90 \cdot \%Si + 200 \%Mo) \cdot \frac{I(x)}{I(0.1)}$$

Donde T es la temperatura en $^{\circ}C$, x es la fracción transformada, Ac_1 es la temperatura de equilibrio entre las fases de austenita con la perlita, Q_{ef} es la energía de activación efectiva para que se produzca la difusión y $I(x)$ es la integral de la derecha de la ecuación original de Kirkaldy.

5. Resultados.

Para la validación del modelo usamos fuentes de diagramas experimentales del “Metal Handbook” [6] y “Atlas of Time-Temperature diagrams” de la ASTM [7].

Las temperaturas críticas Ac_1 para la transformación perlítica y Ac_3 para la transformación ferrítica se obtuvieron de los datos de la Tabla 1, [8].

Como resultado de diferentes regresiones en función de la composición para determinar Ac_3 se obtuvo la siguiente ecuación:

$$Ac_3 := 967.899 + 3451.44S - 194.122C - 6587.85P - 20.9767Mn - 4.91356Mo - 11.3655Ni + 60.9953Si + 0.549988Cr$$

Tabla 1: Aleaciones con sus temperaturas de equilibrio [8].

Acero	Ac1	Ac3	Ar3	Ar1	Acero	Ac1	Ac3	Ar3	Ar1	Acero	Ac1	Ac3	Ar3	Ar1
1010	724	877	849	682	3140	735	766	721	660	5120	766	838	799	699
1020	724	846	816	682	4027	727	807	760	671	5140	738	788	727	693
1030	727	813	788	677	4042	727	793	732	654	5160	710	766	716	677
1040	727	793	757	671	4130	757	810	754	693	52100	727	768	716	688
1050	727	768	741	682	4140	732	804	743	679	6150	749	788	743	693
1060	727	746	727	685	4150	743	766	729	671	8115	721	838	788	671
1070	727	732	710	691	4340	724	774	710	654	8620	732	829	768	660
1080	729	735	699	693	4615	727	810	760	649	8640	732	779	727	666
1340	716	777	721	621	5046	716	771	732	682	9260	743	816	749	713

Sin embargo para el caso de la temperatura Ac1, dependiente de los elementos de aleación Cr, Mn, Ni y el Mo, se obtuvo una regresión confiable. Por lo que se recomienda la búsqueda de este valor que oscila alrededor de la temperatura de la línea Ac1 del diagrama de fase Fe-Fe₃C (727 °C).

La energía de activación varía como una función dependiente de los elementos de aleación y del tamaño de grano, en la literatura consultada no se ha encontrado una ecuación donde se vinculen ambos efectos, sin embargo se reconoce este vínculo. Kaufman planteó que la energía de activación disminuía con el aumento del contenido de carbono, posteriormente muchos investigadores demostraron que la presencia de los elementos de aleación, tales como el Si y el Mn pueden atrasar la ocurrencia de la transformación como consecuencia del efecto de arrastre del soluto, y presentaron una ecuación de la energía de activación para la difusión (Q_{ef}), en función del carbono equivalente [4].

$$Q_{ef} := 38300 - 1.9 \cdot 10^5 \cdot C_{eq} + 5.5 \cdot 10^5 \cdot C_{eq}^2$$

$$C_{eq} := C + \frac{Mn}{6} + \frac{Si}{24}$$

El dato de la energía de activación para la difusión del carbono en matrices ferríticas y austeníticas es 80 y 148 kJ/mol respectivamente [9].

A partir de esta información es posible obtener los gráficos del modelo modificado de Kirkaldy. El tiempo τ se colocó en función de: la temperatura de la transformación (T), la fracción transformada (x), la temperatura de equilibrio de la nueva fase con la austenita (Ac1 o Ac3), el tamaño de grano (N) y energía de activación efectiva (Q_{ef}); representando

gráficamente la temperatura (T) contra el resultado del tiempo de transformación ($\tau(T, x, Ac1, N, Q_{ef})$). Como se trabajó con el inicio de la transformación perlítica se utilizó: $\tau(T, 0.1, Ac1, N, 80000)$, la temperatura Ac1 de la Tabla 1 y el tamaño de grano N que aparece en la referencia bibliográfica [6 y 7] específico para cada aleación,

6. Conclusiones.

Después de analizar los diferentes modelos y su comportamiento se puede mencionar las siguientes conclusiones:

- El modelo desarrollado por Kirkaldy resulta el de más fácil uso y ofrece buenos resultados en lo que respecta a la exactitud de la aproximación.
- En los aceros al carbono hipoeutectoides, los mejores resultados se aprecian cuando se acercan a la composición eutécticoide (0.79 %C).
- En la medida que aumenta la concentración de los elementos aleados, aumentan las diferencias entre la curva modelada y la curva experimental.

Los autores consideran que este resultado es un primer acercamiento al complejo mundo de la modelación de las curvas TTT, permitiendo probar e identificar, gráficamente cuales son las variables que influyen en la obtención de un resultado cada vez más próximo al experimental. Además, en alguna medida permite explorar y obtener, por ingeniería inversa, algunos valores aproximados como la energía de activación y la temperatura de equilibrio Ac1.

7. Bibliografía.

- [1]. J.S. Kirkaldy, B.A. Thomson, and E.A. Baganis, *Hardenability Concepts with Applications to Steel*, eds. J.S. Kirkaldy and D.V. Doane, (Warrendale, PA: AIME, 1978).
- [2]. C. Zener, Trans.AIME, 167 (1946).
- [3]. M. Hillert, *Jerkontorets Ann.*, 141 (1957).
- [4]. YEONG- TSUEN PAN. "Measurement and Modelling of diffusional transformation of austenite in C-Mn steels", Tesis doctoral, Taiwan, 2001.
- [5] N. Saunders, Z. Guo, X. Li, A.P. Miodownik and J.P. Schillé, "The Calculation of TTT and CCT diagrams for General Steels", 2004.
- [6]. Metals Handbook, ASM 1992, Ohio,USA.
- [7]. "Atlas of Time-Temperature diagrams" de la ASTM.
- [8]. Avner, Sydney H., *Introducción a la Metalurgia Física*. Ed. Pueblo y Educación, La Habana , 1963.
- [9]. W. D. Calister, Jr., "Material Science and Engineering an Introduction", 2000.

Selection and use of a model for the beginning of pearlitic transformation during the cooling in low alloy steel.

Abstract:

Time-Temperature-Transformation diagrams of steels are of great importance for industry related to steel manufacturing. The development reached in obtaining mathematic models for these curves has allowed the industry research engineer and student to be closer to the comprehension of the influential variables in the austenitic transformation. In this paper different models presented in the consulted literature were valorated. As a result, we show a model for the starting pearlitic transformation curves, depending of the steel composition, the grain size, the undercooling temperature, and the activation energy. The mentioned determine the different shapes the curves. The use of this model gives us the possibility of approaching to the creation of a virtual classroom using the calculation methodology, as well as a tool to improve and widen the possibilities of the result presented in this work.

Key word: Kirkaldy model, TTT, diffusional transformation austenite.