

Caracterização microestrutural de um aço inoxidável austeno-ferrítico, por meio do *software* Factsage

Microstructural characterization of austenitic-ferritic stainless steel, using Factsage software

Karen Farias Cirilo¹Pedro Henrique Espírito Santo²André Itman Filho³Estéfano Aparecido Vieira⁴Thiago Barreto da Silva Amaral⁵Rosana Vilarim da Silva⁶

Resumo

Os aços inoxidáveis austeno-ferríticos apresentam estrutura ferrítica e austenítica com intermetálicos dispersos na matriz. Tais precipitados, responsáveis pelas propriedades mecânicas do material, dependem da composição química e do processo de fabricação. A identificação desses intermetálicos pode ser feita com o *software* FactSage, sistema computacional integrado com acesso às informações termodinâmicas das soluções. O FactSage pode estimar as quantidades das fases complexas dos aços inoxidáveis austeno-ferríticos e, em particular, a precipitação da fase sigma e de Laves, considerando as condições de equilíbrio termodinâmico. No entanto, os resultados das simulações podem ser diferentes aos dos procedimentos experimentais, pois as microestruturas desses aços variam, conforme as diferentes condições de tratamento térmico. Nesse artigo, o objetivo foi comparar os resultados da simulação com os do procedimento experimental. Embora a simulação indique a formação da fase sigma e de Laves nos dois tratamentos térmicos, solubilizado e solubilizado mais envelhecido, a análise microestrutural revela apenas a fase sigma, na segunda condição.

Palavras-chave: *Software* FactSage. Aço inoxidável austeno-ferrítico. Fase de Laves e sigma.

Abstract

Austenitic-ferritic stainless steels have a ferritic and austenitic structure with intermetallics dispersed in the matrix. Such precipitates, responsible for the mechanical properties of the material, depend on the chemical composition and manufacturing process. The identification of these intermetallics can be done with the FactSage software, an integrated computational system with access to the thermodynamic informations of the solutions. FactSage can estimate the quantities of the complex phases of austenitic-ferritic stainless steels and, in particular, the precipitation of the sigma and Laves phases, considering thermodynamic equilibrium conditions. However, the simulation results may be different from those of experimental procedures, because the microstructures of these steels vary depending on different heat treatment conditions. In this paper, the objective was to compare the results of the simulation with those of the experimental procedures. Although the simulation indicates the formation of the sigma and Laves phases in the two heat treatments conditions, solubilized and solubilized plus aged, the microstructural analysis reveals only the sigma phase, in the second condition.

Keywords: *Software* FactSage. Austenitic-ferritic stainless steels. Sigma and Laves phases.

1 Acadêmico de Engenharia Metalúrgica no Instituto Federal do Espírito Santo (IFES), Vitória, ES, Brasil. ORCID: <https://orcid.org/0009-0003-9363-9566>. E-mail: karenfcirilo@gmail.com

2 Acadêmico do IFES. ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-5940-4108>. E-mail: lauretpedro5@gmail.com

3 Doutor em Ciência e Engenharia dos Materiais pela Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), São Carlos, SP, Brasil. Professor do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais do IFES. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2398-1660>. E-mail: andrei@ifes.edu.br

4 Doutor em Ciência e Engenharia dos Materiais pela UFSCar. Coordenador do Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais do IFES. ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2131-6920>. E-mail: estefanovieira@ifes.edu.br

5 Doutor em Química pelo Instituto Militar de Engenharia (IME), Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Professor do Curso de Engenharia Metalúrgica do IFES. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1903-6770>. E-mail: tbsamaral@gmail.com

6 Doutora em Ciência e Engenharia dos Materiais pela Escola de Engenharia de São Carlos-SP (EESC-USP), São Carlos, SP. Professora do Programa de Pós-graduação em Tecnologias Sustentáveis do IFES. ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9768-6691>. E-mail: rosana-vilarim@gmail.com

1 Introdução

Os aços inoxidáveis são materiais utilizados em diversas aplicações, tais como: a indústria química, petroquímica, geração de energia, bombas, implantes e instrumentos cirúrgicos, além de uma infinidade de outros produtos de uso doméstico e comercial. De acordo com a microestrutura, os aços inoxidáveis podem ser classificados como austeníticos, ferríticos, duplex (austeno-ferríticos) e martensíticos. Existem também os aços endurecíveis por precipitação, conhecidos por PH do inglês "Precipitation Hardening", cujas matrizes podem ser martensíticas ou austeníticas.

No caso dos aços inoxidáveis austeno-ferríticos ou duplex, são materiais utilizados em plataformas fixas e flutuantes que operam em profundidades de 2000 m abaixo do nível do mar, em componentes fundidos como as bombas que injetam água salgada no subsolo marítimo e situações, onde a resistência à corrosão e mecânica são importantes (Gunn, 2001). A composição química desses aços apresenta, em geral, os seguintes valores em porcentagem de peso: carbono de 0,02 a 0,10%, cromo de 19,0 a 28,0%, níquel de 3,0 a 8,0%, molibdênio de 1,5 a 5,0%, nitrogênio de 0 a 0,3% e cobre de 0,5 a 3%.

Os aços inoxidáveis austeno-ferríticos apresentam melhor combinação de propriedades mecânicas e resistência à corrosão, com relação aos inoxidáveis convencionais, e são utilizados em substituição aos austeníticos em diversas aplicações, tais como: a indústria química, petroquímica e geração de energia. De uma forma geral, esses aços apresentam ilhas de austenita em uma matriz ferrítica, com frações volumétricas dependentes da composição química e do tratamento térmico. O cromo é o responsável pela formação de um filme passivo de óxidos (Cr_2O_3), que protege a liga contra a corrosão, na maioria dos meios onde são utilizadas (Francis; Byrne, 2021).

O molibdênio atua como estabilizador da fase ferrítica e possui grande influência na passividade e resistência à corrosão, sobretudo em meios com íons cloretos, no qual o filme passivo de cromo é pouco estável. No entanto, a presença dos valores máximos de cromo e molibdênio favorecem à formação das fases sigma (σ) e chi (χ) que prejudicam as propriedades mecânicas e a resistência à corrosão.

Com relação ao níquel e o nitrogênio, esses elementos estabilizam a austenita. O primeiro favorece a tenacidade e a soldabilidade do aço, enquanto o segundo proporciona maior resistência à corrosão. No entanto, uma maior adição de nitrogênio, favorece

à formação de nitretos com redução da resistência à corrosão (Speidel, 2006).

De uma forma geral, a solidificação dos inoxidáveis duplex inicia em torno de 1450 °C com a formação da ferrita (α) que dá origem a austenita (γ) próxima a 1300 °C. Posteriormente, há formação de diversas fases secundárias no resfriamento, com influência negativa nas propriedades mecânicas e resistência à corrosão. As fases sigma e chi aparecem na faixa de temperatura de 600 a 950 °C. Sigma é um intermetálico, preferencialmente com ferro, cromo e molibdênio de reticulado cristalino tetragonal, que reduz acentuadamente a tenacidade e provoca a redução da resistência à corrosão (Itman Filho *et al*, 2013). Embora em menor quantidade, a fase chi (χ) precipita na maioria dos aços inoxidáveis duplex e reduz a tenacidade de forma semelhante à sigma (Magnabosco, 2009).

Outros precipitados como os carbonetos M_7C_3 precipitam na faixa de 950 a 1050 °C nos contornos de grão γ/α . Abaixo de 950 °C, formam-se os carbonetos M_{23}C_6 . A precipitação da fase ϵ , contendo cobre, que aumenta consideravelmente a dureza da matriz, é de difícil identificação. Outro precipitado, alfa linha (α') formado na faixa de 350 a 550 °C é rico em cromo, é coerente com a matriz e aumenta a dureza com redução da resistência à corrosão e tenacidade (Lu; Guo; Liang, 2022).

Uma fase interessante é a de Laves com estrutura hexagonal compacta que pode ser formada com diferentes elementos químicos, tais como, Cr_2Nb , Fe_2Mo , Fe_2Ti , Fe_2Nb . A precipitação ocorre na forma de ripas na matriz e está associada à fragilização da liga (Itman Filho *et al*, 2014; Zhu *et al.*, 2023).

Concomitantes às fases anteriores, outras também são formadas no resfriamento e são de difícil caracterização nos microscópios óticos e eletrônicos convencionais. No entanto, por meio da termodinâmica computacional e, utilizando o *software* FactSage (*Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics*), é possível prever a quantidade e a estequiometria dos intermetálicos precipitados. Esse *software* é um sistema computacional totalmente integrado com acesso às informações termodinâmicas que permite prever as quantidades, características e temperaturas de formação das fases de diversos materiais expostos em diferentes temperaturas (Jung; Van Ende, 2020).

O *software* possui vários módulos de cálculo, uma base de dados ampla e um módulo de geração de diagramas de fases, com fácil visualização das transformações metalúrgicas. O programa foi

desenvolvido pelos grupos CRCT (*Center for Research in Computational Thermochemistry – Montreal*) e GTT-Technologies (Aachen) e é composto por uma série de módulos de informações, bancos de dados, cálculos e simulações. O *software* é uma ferramenta poderosa que permite a realização de cálculos termoquímicos nas áreas de metalurgia, materiais cerâmicos, engenharia química, eletroquímica e outras. O programa também fornece informações das fases formadas, as proporções e composições, as atividades individuais de cada componente químico e as propriedades termodinâmicas para várias composições, pressões e temperaturas. É utilizado em mais de 250 universidades e 250 empresas ao redor do mundo, como uma ferramenta para a pesquisa e ajuda educacional (Luz; Pandolfelli, 2011).

Nesse contexto e para caracterizar as principais

fases formadas durante o resfriamento, foi utilizada a simulação termodinâmica, considerando como referência a composição química de um aço inoxidável austeno-ferrítico similar ao SEW 410 Nr 1.4517.

2 Materiais e métodos

2.1 Elaboração do aço

O aço inoxidável austeno-ferrítico, com a composição química, mostrada na tabela 1, foi elaborado em um forno de indução com capacidade para 300 kg na fundição Grupo Metal em Tietê/SP. O metal líquido foi vazado na temperatura aproximada de 1500 °C em um molde de areia tipo quilha e resfriado ao ar. Os teores dos elementos químicos foram determinados por meio do espectrômetro de emissão óptica da marca Oxford Instruments, modelo Foundry-Master Pro.

Tabela 1 – Composição química do aço inoxidável austeno-ferrítico (% em peso)

Elementos	C _(max.)	Cr	Ni	Mo	Cu	Mn	Si	N
Aço	0,026	26,98	6,44	3,22	2,99	1,47	0,84	0,22

Fonte: Rossitti (2000).

Esses valores foram utilizados na simulação computacional, com o software FactSage, para caracterizar os precipitados formados no resfriamento, considerando a temperatura de vazamento do metal a 1500 °C até o resfriamento hipotético até 0 °C.

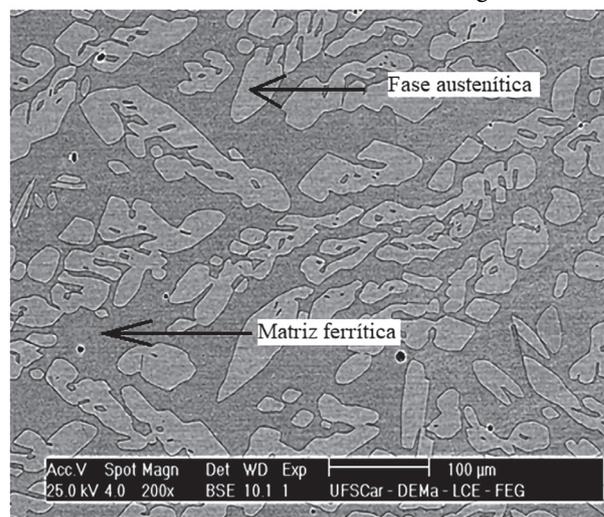
2.2 Tratamentos térmicos e a caracterização microestrutural

Inicialmente, duas amostras cúbicas de 15 mm de lado e com estrutura bruta de fundição foram cortadas da quilha, aquecidas a 1050 °C e resfriadas em água. Posteriormente, uma delas foi aquecida a 850 °C seguido de resfriamento em água. O tempo de permanência no forno, nos dois aquecimentos, foi de uma hora. Após preparação metalográfica convencional e ataque com o reagente Behara, as microestruturas foram observadas em um microscópio eletrônico de varredura (MEV).

A figura 1 mostra as fases ferrítica e austenítica no aço. Após o aquecimento a 1050 °C e resfriamento em água, a fase sigma e outros possíveis intermetálicos são eliminados da microestrutura.

Na figura 2, com o tratamento térmico de solubilização a 1050 °C, seguido de envelhecimento a 850 °C, é possível observar a fase sigma precipitada nos contornos de grão γ/α . Sigma é um precipitado formado, em geral, na faixa de 600 a 1000 °C, que cresce em direção à matriz ferrítica (Josefsson; Nilsson, 1991).

Figura 1 – Fase austenítica (cinza claro) envolvida pela matriz ferrítica (cinza escura), após aquecimento a 1050 °C com resfriamento em água

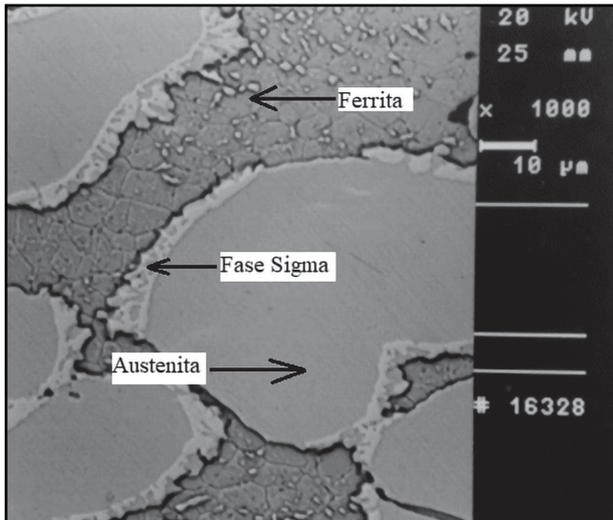


Fonte: Os autores (2023).

A fase sigma é um composto intermetálico formado principalmente com Fe-Cr ou Fe-Cr-Mo. A presença de cromo e molibdênio é comum, pois os dois são elementos químicos presentes em maior quantidade na ferrita do que na austenita. A fase sigma apresenta um reticulado cristalino tetragonal com 30 átomos na célula unitária e reduz acentuadamente a ductilidade e a resistência ao impacto do aço

(Josefsson; Nilsson, 1991; Li; Mu; Riquier, 1994). A precipitação de 1% de fase sigma causa uma redução de 50% na energia, absorvida no ensaio de impacto nos aços austeno-ferríticos e diminui a resistência à corrosão da matriz (Charles; Bernhardsson, 1991).

Figura 2 – Fase sigma (branca) formada nos contornos de grão da austenita (cinza claro) e ferrita (cinza escuro), após aquecimento a 1050 °C e envelhecimento a 850 °C



Fonte: Os autores (2023).

2.3 Identificação das fases com o software FactSage

A determinação das fases precipitadas, considerando o equilíbrio termodinâmico, foi realizada com o software FactSage, versão 8.0, a partir das bases FSteel utilizada para ligas de aço, contendo diferentes elementos de liga e FactPs, utilizada para substâncias puras. As principais fases selecionadas no programa foram: FCC (fase austenita), BCC (fase ferrita), M23C6 (carbonetos formados com cromo, níquel e manganês), M7C3 (carbonetos formados com cromo, níquel, molibdênio e manganês), M3C2 (carbonetos formados por cromo e molibdênio), M6C (carbonetos formados por molibdênio e tungstênio), sigma (fase formada, durante o resfriamento lento em ligas, contendo alto teor de cromo, molibdênio e vanádio) e Laves (fase formada em aços inoxidáveis, contendo principalmente cromo, nióbio e titânio). Os parâmetros selecionados foram a massa de 100 gramas, considerando os percentuais dos elementos químicos apresentados na tabela 1, as temperaturas na faixa de 0 a 1500 °C e a pressão de uma atmosfera.

Conforme a simulação computacional, sigma é favorecida pela combinação de ferro, cromo e molibdênio ($Fe_8Cr_4Mo_{18}$ e $Fe_8Mo_4Cr_{18}$) e pelos compostos com a estequiometria de 30 átomos, mostrados na tabela 2 (Hochmann *et al.*, 1974).

Tabela 2 – Possíveis espécies formadoras da fase sigma, considerando o equilíbrio termodinâmico, a partir da base Fsteel do FactSage

#	Species	Gram [min]	Gram [max]	Wt.% [min]	Wt.% [max]	Activity [min]	Activity [max]
SIGM		SIGMA					
102	Fe8Cr4Cr18	0	14.786	1.4419E-09	54.189	5.6605E-22	2.9131E-05
103	Ni8Cr4Cr18	0	2.4462	0.203238	16.417	4.3298E-46	9.7565E-14
104	Fe8Mo4Cr18	0	0.841829	1.2177E-20	4.8884	3.0765E-86	3.6214E-12
105	Ni8Mo4Cr18	0	6.4082E-02	1.7140E-12	0.340817	7.5813E-92	7.9797E-36
106	Fe8Cr4Fe18	0	13.472	4.1630E-09	46.135	3.1161E-49	2.4527E-06
107	Ni8Cr4Fe18	0	1.2528	0.586446	19.879	3.9069E-38	3.6750E-13
108	Fe8Mo4Fe18	0	0.833552	3.5012E-20	8.093	2.4358E-32	1.0317E-05
109	Ni8Mo4Fe18	0	6.3421E-02	4.9258E-12	0.553094	6.3176E-156	6.5301E-28
110	Fe8Cr4Mo18	0	2.1342	7.0717E-07	6.232	7.2963E-66	1.4812E-17
111	Ni8Cr4Mo18	0	3.3262	0.212894	99.21	1.5705E-31	0.813954
112	Fe8Mo4Mo18	0	0.116946	5.7748E-18	0.685758	2.8937E-34	8.2615E-17
113	Ni8Mo4Mo18	0	8.8671E-03	8.0964E-10	5.1122E-02	1.1432E-44	2.3032E-29
114	Fe8Cr4Ni18	0	0.642473	4.7130E-13	3.4242	1.5321E-69	7.1605E-27
115	Ni8Cr4Ni18	0	0.115704	6.6365E-05	0.483059	2.1087E-109	3.4778E-40
116	Fe8Mo4Ni18	0	4.0857E-02	3.9524E-24	0.594016	1.5865E-139	9.1981E-32
117	Ni8Mo4Ni18	0	3.1076E-03	5.5587E-16	4.1312E-02	5.0305E-75	8.7414E-35

Fonte: Os autores (2023).

Similar à sigma na tabela 2, a tabela 3 destaca os possíveis compostos formados, termodinamicamente com a estequiometria da fase de Laves.

Na figura 3, é possível observar a quantidade total da fase sigma, considerando as estequiometrias da

tabela 2 em 100 g do aço. Nesse caso, a simulação mostra a maior quantidade formada de 35,05 g na temperatura de 700 °C. Com relação à Laves, na mesma figura, a quantidade máxima é 6,62 g a 250 °C.

Para determinar as quantidades das fases sigma,

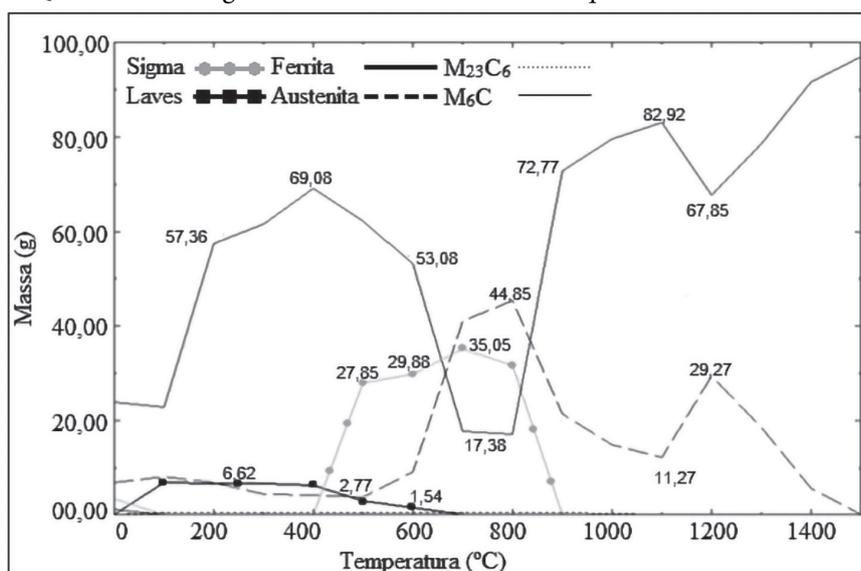
referentes às estequiometrias $Fe_8Cr_4Mo_{18}$ e $Fe_8Mo_4Cr_{18}$ considerando sigma e apenas esses dois compostos com foi confeccionada a figura 4. A simulação foi feita, a ampliação na região entre 400 a 1000 °C da figura 3.

Tabela 3 – Possíveis espécies formadoras da fase de Laves, considerando o equilíbrio termodinâmico, a partir da base Fsteel do FactSage

#	Species	Gram (min)	Gram (max)	Wt.% (min)	Wt.% (max)	Activity (min)	Activity (max)
LAV1#	1	LAVES C14					
171	Cr2Cr1	0	1.2653E-03	4.8357E-05	2.6012E-02	1.1701E-03	6.8557E-02
172	Cu2Cr1	0	8.9075E-06	1.6061E-09	3.1114E-04	6.9373E-11	1.8656E-05
173	Fe2Cr1	0	3.2859E-03	1.1191E-04	7.8315E-02	2.0317E-10	7.5562E-05
174	Mn2Cr1	0	4.6182E-09	3.1861E-11	6.9921E-08	1.6462E-16	2.4792E-11
175	Ni2Cr1	0	6.2895E-07	1.9604E-10	1.1147E-05	3.5405E-07	4.2613E-04
176	Cr2Cu1	0	1.4163E-04	8.1658E-08	5.6974E-03	2.1691E-10	5.6572E-05
177	Cu2Cu1	0	9.8821E-07	2.6880E-12	6.7543E-05	1.3499E-03	0.170724
178	Fe2Cu1	0	3.6663E-04	1.8836E-07	1.7097E-02	6.4980E-11	2.4918E-05
179	Mn2Cu1	0	2.9124E-10	5.3667E-14	4.4095E-09	5.4286E-17	7.7178E-12
180	Ni2Cu1	0	7.0020E-08	3.2924E-13	2.4281E-06	3.6952E-13	4.2937E-08
181	Cr2Fe1	0	4.7108E-03	2.0554E-04	0.153181	3.7120E-10	1.1385E-04
182	Cu2Fe1	0	9.4466E-06	2.4509E-06	1.4493E-04	3.7970E-11	1.2381E-05
183	Fe2Fe1	0	9.5792E-03	6.1811E-04	0.354097	2.3689E-07	7.1539E-02
184	Mn2Fe1	0	2.3438E-08	6.5904E-12	6.5479E-07	1.0925E-16	1.2618E-11
185	Ni2Fe1	0	1.2123E-06	8.7910E-08	1.8599E-05	6.3237E-13	8.3811E-08
186	Cr2Mn1	0	7.4197E-08	1.6998E-09	1.1234E-06	4.7605E-12	2.8384E-08
187	Cu2Mn1	0	3.0283E-10	5.6320E-14	4.5849E-09	4.8695E-13	2.6700E-09
188	Fe2Mn1	0	1.7937E-07	3.9303E-09	2.7156E-06	1.4261E-12	1.0173E-08
189	Mn2Mn1	0	2.7896E-13	5.0748E-16	4.3514E-12	4.9988E-18	1.4250E-06
190	Ni2Mn1	0	3.6774E-11	6.8809E-15	5.5676E-10	8.1098E-15	4.3695E-11
191	Cr2Ni1	0	6.1776E-05	2.9066E-06	9.3530E-04	2.0354E-05	5.4050E-03
192	Cu2Ni1	0	2.5182E-07	9.6026E-11	4.3879E-06	2.8633E-12	3.7856E-07
193	Fe2Ni1	0	1.4918E-04	6.7136E-06	2.2586E-03	8.3857E-12	1.4957E-06
194	Mn2Ni1	0	2.3208E-10	1.9122E-12	3.5137E-09	2.0542E-18	8.4236E-13
195	Ni2Ni1	0	3.0563E-08	1.1745E-11	4.6273E-07	6.1589E-09	3.3596E-05
196	Cr2Mo1	0	1.9635	25.02	33.854	1.0677E-02	0.116086
197	Cu2Mo1	0	1.2707E-02	9.7582E-04	0.290787	7.9412E-12	3.0649E-06
198	Fe2Mo1	0	4.7744	65.926	74.549	4.6484E-02	0.505739
199	Mn2Mo1	0	8.9245E-06	7.9653E-07	1.7559E-04	2.3294E-17	2.9805E-12
200	Ni2Mo1	0	9.4635E-04	1.2045E-04	1.4328E-02	1.3226E-13	1.8621E-08

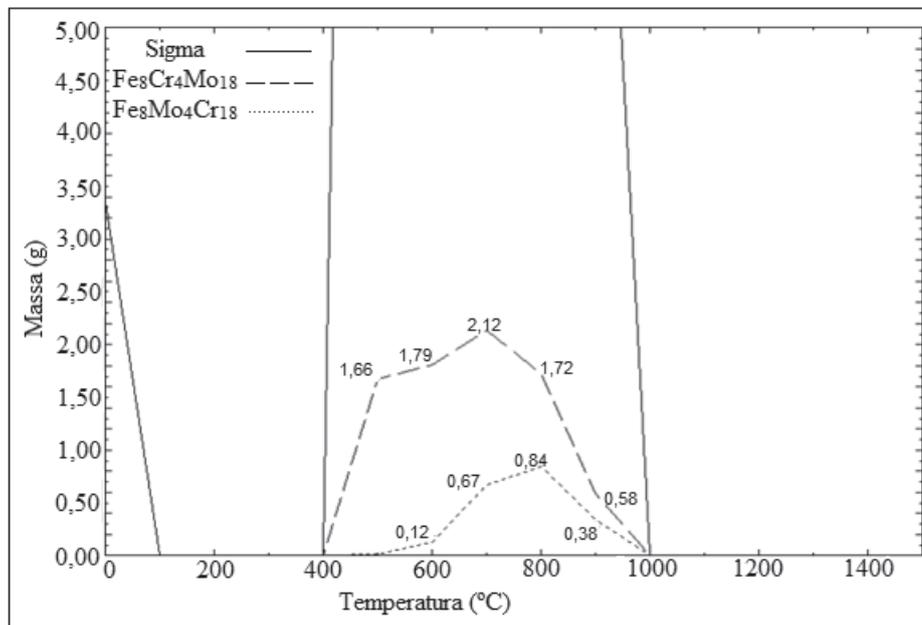
Fonte: Os autores (2023).

Figura 3 – Quantidade de sigma, considerando todas as estequiometrias, mostradas na tabela 2



Fonte: Os autores (2023).

Figura 4 – Quantidades dos compostos com as estequiometrias $\text{Fe}_8\text{Cr}_4\text{Mo}_{18}$ e $\text{Fe}_8\text{Mo}_4\text{Cr}_{18}$ na composição total da fase sigma



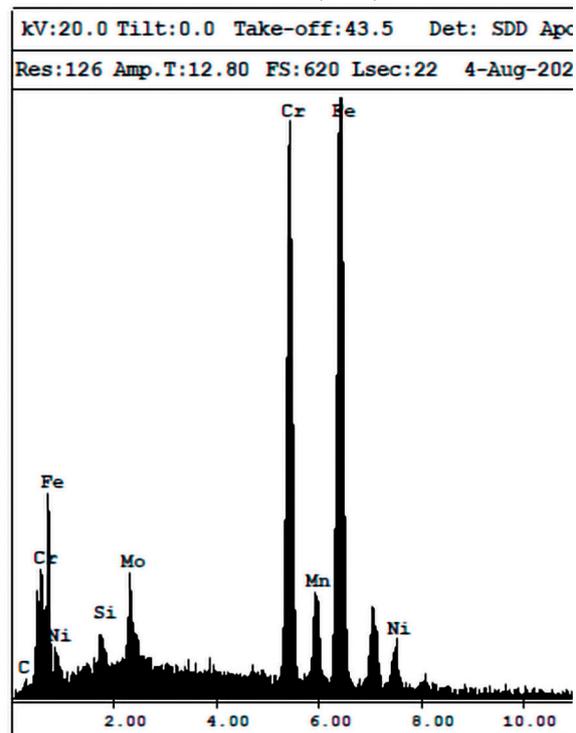
Fonte: Os autores (2023).

Nesse caso, temos o valor máximo de 2,12 g de $\text{Fe}_8\text{Cr}_4\text{Mo}_{18}$ a 700 °C e 0,84 g de $\text{Fe}_8\text{Mo}_4\text{Cr}_{18}$ a 800 °C. É importante ressaltar que esses valores são os mais prováveis experimentalmente, como mostra o espectro de raios X na figura 5. Os picos de concentração, via energia dispersiva (EDS) dos elementos, são representativos da fase sigma, mostrada na figura 2, e indica a predominância de ferro, cromo e molibdênio. Esse resultado corrobora com os obtidos na simulação pelo *software* FactSage. No caso do ferro, a intensidade energética do feixe de elétrons do microscópio eletrônico de varredura foi suficiente para interagir com os orbitais eletrônicos K, L e M do elemento, de tal forma a gerar dois picos, com diferentes intensidades. Nesse caso, estão indicados o k_α e o k_β do ferro, com os valores de 6,4 keV e 0,7 keV respectivamente (Flewitt; Wild, 1986). A presença de diversos picos na figura 5, também está associada à energia do feixe de elétrons que interfere com os outros elementos químicos presentes na matriz.

Considerando as análises microestruturais nas figuras 1 e 2, as simulações computacionais das figuras 3 e 4 e o espectro de concentração da fase sigma na figura 5, é possível afirmar que, embora as simulações com o FactSage indiquem a presença das fases sigma e de Laves no aço, os resultados experimentais mostram apenas a primeira, após a solubilização seguida de envelhecimento. Laves pode ser formada com diferentes estequiometrias, tais como, Fe_2Nb , Fe_2Mo ,

Fe_2Ti e outras, e é comum nos aços austeno-ferríticos modificados com nióbio (Itman Filho *et al.*, 2014).

Figura 5 – Picos de concentração dos elementos ferro, cromo e molibdênio, mostrados no espectro de concentração da fase sigma, obtido via energia dispersiva de raios X (EDS)



Fonte: Os autores (2023).

3 Conclusão

A análise com o *software* FactSage indica a presença da fase sigma e de Laves, considerando a composição química do aço austeno-ferrítico elaborado. No entanto, a análise microestrutural revela apenas a fase sigma, após solubilização a 1050 °C seguida de envelhecimento a 850 °C. Isso ocorre, pois a simulação computacional considera as condições de equilíbrio termodinâmico das reações e deve ser aceita com restrições. Em geral, são necessários os resultados experimentais para confirmarem os da simulação.

Referências

- CHARLES, J.; BERNHARDSSON, S. **Duplex stainless steels**. S. Les Ulis: Physique, 1991. v. 1. p. 147-152
- FLEWITT, P. E. J.; WILD, R. K. **Microstructural characterisation of metals and alloys**. London: The Institute of Metals, 1986.
- FRANCIS, R.; BYRNE, G. Duplex stainless steel: alloys for the 21st century. **Metals**, v. 11, n. 5, p. 836, 2021. DOI: 10.3390/met11050836.
- GUNN, R. N. **Duplex stainless steel: microstructure, properties and applications**. Cambridge: Abington, 2001.
- HOCHMANN, J. *et al.* Propriétés des aciers inoxydables ferritiques à teneur élevée em chrome, ductiles et des aciers inoxydables austéno-ferritiques. **Métaux Corrosion-Industrie**, v. 591-592, p. 390-423, 1974.
- ITMAN FILHO, A. *et al.* Austenitic-ferritic stainless steel containing niobium. **Revista da Escola de Minas**, v. 66, n. 4, p. 467-471, 2013. DOI: 10.1590/S0370-44672013000400010.
- ITMAN FILHO, A. *et al.* Effect of niobium in the phase transformation and corrosion resistance of one austenitic-ferritic stainless steel. **Material Research**, v. 17, n. 4, p. 801-806, 2014. DOI: 10.1590/1516-1439.190113.
- JOSEFSSON, B.; NILSSON, J. O. **Duplex stainless steels: phase transformation in duplex steels and relation between continuous cooling and isothermal heat treatment**. S. Lee Ulis: Physique, 1991.
- JUNG, I.; VAN ENDE, M. Computational thermodynamic calculations: FactSage from CALPHAD thermodynamic database to virtual process simulation. **Metallurgical and Materials Transactions: B**, v. 51, n. 5, p. 1851-1874, 2020. DOI:10.1007/s11663-020-01908-7.
- LI, J.; MU, T.; RIQUIER, Y. s-phase precipitation and it's effect on the mechanical properties of a duplex stainless steel. **Materials Science and Engineering: A**, v. 174, n. 2, p. 149-156, 1994. DOI: 10.1016/0921-5093(94)91083-9.
- LU, H.; GUO H.; LIANG, W. The dissolution behavior of σ -phase and the plasticity recovery of precipitation-embrittlement super-ferritic stainless steel. **Materials Characterization**, v. 190, 112050, 2022. DOI: 10.1016/j.matchar.2022.112050.
- LUZ, A. P.; PANDOLFELLI, V. C. Simulação termodinâmica e sua aplicação na avaliação do desempenho de materiais refratários. **Cerâmica**, v. 57, n. 343, p. 294-304, 2011. DOI: 10.1590/S0366-69132011000300007.
- MAGNABOSCO, R. Kinetics of sigma phase formation in a duplex stainless steel. **Materials Research**, v. 12, n. 3, p. 321-327, 2009. DOI: 10.1590/S1516-14392009000300012.
- ROSSITTI, S. M. **Efeito do nióbio na microestrutura e nas propriedades mecânicas do aço inoxidável superduplex fundido SEW 410 W. Nr. 1.4517**. 2000. 171 f. Tese (Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.
- SPEIDEL, M. O. Nitrogen containing austenitic stainless steels. **Materials Science & Engineering Technology**, v. 37, n. 10, p. 875-880, 2006. DOI: 10.1002/mawe.200600068.
- ZHU, Y. *et al.* A novel precipitation mechanism of Laves phase in Fe-30Cr-2Mo super ferritic stainless steel: in-situ phase transformations. **Materials Letters**, v. 338, 134022, 2023. DOI: 10.1016/j.matlet.2023.134022.

