



Aluna: Adriely Tura Carvalho

Orientador: Dr. Ausdinir Danilo Bortolozo

Vigência: 2019/2020

Estudo da viabilidade da rota de metalurgia do pó na manufatura do composto multicomponente principais complexo MoNbTiW

1. OBJETIVOS

O intuito deste projeto de iniciação científica foi buscar a melhor condição para a liga de multicomponentes principais, composta por metais refratários Mo-Nb-Ti-W. Para tanto, as amostras foram desenvolvidas por meio da metalurgia do pó e tratadas à diferentes temperaturas, visando encontrar as melhores propriedades físicas e mecânicas do material.

2. METODOLOGIA

No início do projeto foi realizada uma simulação da estrutura cristalina em seu estado fundamental da liga para o composto refratário, onde foi utilizado um algoritmo genético, USPEX, em conjunto com um software externo, responsável por realizar os cálculos energéticos das estruturas.

Posteriormente, iniciou-se o processo de manufatura das amostras por metalurgia do pó. Todos os componentes foram pesados separadamente em uma balança analítica e na sequência misturados. As misturas foram compactadas em matrizes cilíndricas de $5 \pm 0,5$ mm por meio de uma prensa hidráulica uniaxial sobre pressão de aproximadamente 640 ± 50 MPa. Após a compactação, a massa das amostras era medida e em seguida as mesmas eram encapsuladas à vácuo, neste processo, utilizou-se óxido de cálcio (CaO) para envolver as amostras com o objetivo de dificultar a reação com o oxigênio, evitando assim, a formação de óxidos durante o tratamento térmico. Os tratamentos térmicos estudados foram de 1200°C por 1,2 e 3 horas,

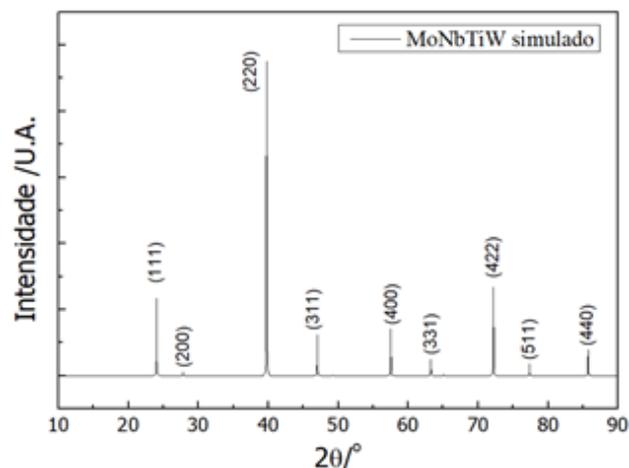
1300°C por 1 e 3 horas, e 1400°C por 1 hora, para ligas com composições equiatômicas e 1300°C por 3 horas, para a composição denominada EDS, 21,52% at. Mo, 46,47% at. Nb, 14,64% at. Ti e 17,37% at. W. Todos os processos de resfriamento foi realizado de maneira rápida.

Após serem submetidas ao tratamento térmico a massa das amostras era medida novamente e sua superfície era tratada, com lixas e polimento. Para então iniciar o processo de análise, onde ocorria o processo de quantificação da densidade através de um kit de densidade acoplado à balança de precisão Shimadzu, modelo SMK-401. O processo de difratometria de raio X, microscopia eletrônica de varredura e de espectroscopia de energia dispersiva, foram utilizados para analisar a formação de fases e suas respectivas proporções. Posteriormente a esta etapa, utilizou-se o software PowderCell [1] para a identificar as estruturas cristalinas formadas. Enquanto os ensaios de dureza e compressão foram utilizados para o estudo do seu comportamento mecânico das ligas.

3. RESULTADOS

O processo de simulação da estrutura cristalina em seu estado fundamental para o composto MoNbTiW em questão, resultou que a mesma é pertencente ao grupo espacial F-43m (216) de parâmetro de rede $a = 0,6405$ nm, sendo o Ti ocupando a posição de Wychoff 4a, Nb (4d), Mo, (4c) e W (4b). Gerando a difratometria exibida na *Figura 01*.

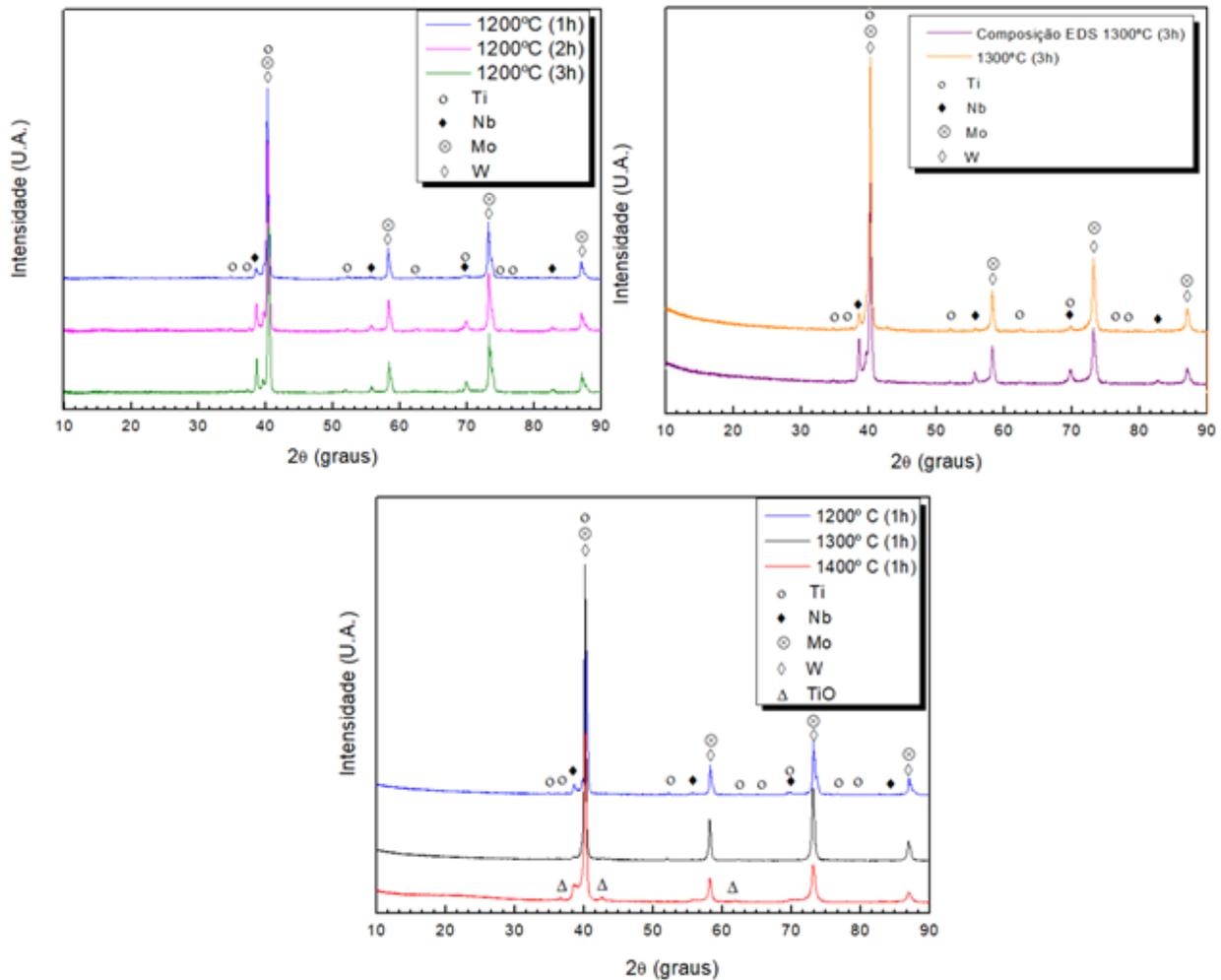
Figura 01. Difratograma simulado para a liga MoNbTiW.



Neste caso não há a interferência de nenhum fator externo que possa deslocar os parâmetros em rede em questão ou corroborar no aparecimento de novos picos a partir de

reações não esperadas, como caso do surgimento de óxidos. Na prática, sabe-se que o contexto é ao contrário e diversos fatores podem influenciar a reação, como pode ser observado na *Figura 02*.

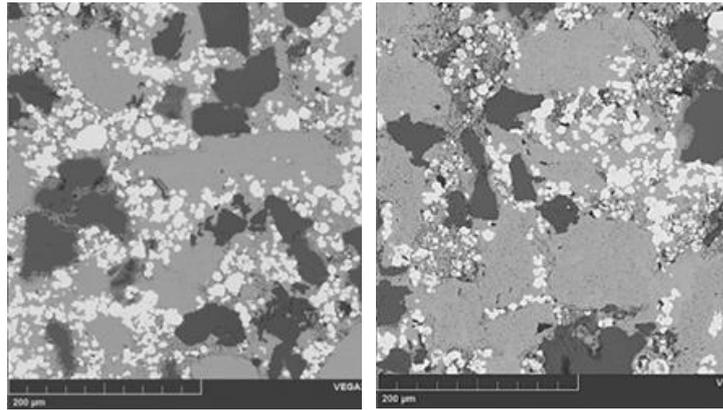
Figura 02. Difratogramas dos tratamentos térmicos das ligas MoNbTiW.



Através da análise de difratometria obtida na *Figura 02* é possível notar que o tratamento térmico realizado à 1300°C por 1 hora apresenta os melhores resultados uma vez que, o mesmo representa a maior dispersão dos componentes, ou seja, maior efetividade no processo de difusão. Além do decréscimo aparente nos picos de Nb.

A análise de microscopia eletrônica de varredura conjuntamente com a análise de espectroscopia de energia dispersiva, retratou o que foi observado na análise de difratometria de raio x ao revelar a existência de Ti livre. Também é possível notar através da *Figura 03* o aumento da fase composta por Nb, representada pela cor cinza escuro, o que coincide mais uma vez com o que foi apresentado na difratometria.

Figura 03. Microscopia da liga MoNbTiW tratada à 1200°C por 2 e 3 horas, 500x.



Após os tratamentos térmicos e a análise por difratometria de raio x, foram realizadas as medidas de propriedades físicas. As massas específicas das amostras foram quantificadas após passarem pelo tratamento térmico, sendo esta uma propriedade fundamental para demonstrar a eficiência do processo de densificação do material na sinterização. Para tanto, realizou-se também os cálculos de porcentagem de densificação, os quais demonstram uma pequena variação entre os tratamentos térmicos de 1200°C e 1300°C com média $83,96 \pm 2,12$ %, por outro lado, para 1400°C há uma diminuição significativa na densificação do material para 74,66 %, esse fato pode ter sido ocasionado pela reatividade da liga com o tubo de quartzo e, assim, gerando a formação de óxidos que pode ter provocado essa maior porosidade da liga.

Em sequência as amostras foram submetidas aos ensaios de dureza e compressão, os quais tiveram o intuito de analisar os efeitos dos diferentes tratamentos sobre as propriedades mecânicas dos materiais. Os resultados obtidos apresentaram grandes variações, sendo a de menor destaque a liga tratada à 1200°C por 3 horas, exibindo valores de dureza de $140,6 \pm 35,4$ HV para a fase clara e $85,2 \pm 18,5$ HV com limite de resistência à compressão de 286,2 MPa, perdendo apenas para a liga tratada à 1400°C por 1 hora, a qual apresentou 226,2MPa para o limite de resistência à compressão, tal resultado pode ser ocasionado pela existência de TiO na amostra. Estes valores obtidos para tais parâmetros são inferiores aos obtidos para as ligas de multicomponentes principais [2], o que também pode estar relacionado a elevada porosidade apresentada pela amostral. Já a liga que ganhou destaque foi a tratada à 1300°C por 1 hora, apresentando dureza de $485,95 \pm 83,80$ HV para a fase clara e $411,94 \pm 8,20$ HV para a fase escura com limite de resistência à compressão de 471MPa, perdendo apenas para a liga de composição EDS tratada à 1300°C por 3 horas, tal liga apresentou um limite de resistência à compressão surpreendente de 503,5 MPa. Fato digno de nota é que a deformação apresentada é relativamente alta para essa classe de materiais, em especial no

caso da composição EDS, onde a deformação é próxima de 25%, a mesma se mostra superior quando comparada à Ti-5Al-2,5Sn, a qual apresenta deformação de 16% [2]. Este resultado demonstra que tal composição pode ser muito promissora para estudos futuros uma vez que a sua exploração foi inviabilizada em função da pandemia e do isolamento social.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] KRAUS, W.; NOLZE, G. Powdercell V2.4 For Windows, Berlim: Federal Institute for Materials Research and Testing, 1999.

[2] CALLISTER, W. D., Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução. John Wiley & Sons, Inc., 2002