



## DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA LA PREDICCIÓN DE LA DUREZA EN LOS ACEROS AISI 1040 Y 4140 TRATADOS TÉRMICAMENTE

FACUNDO QUIÑONES<sup>1</sup>, FERNANDO D. CARAZO<sup>1,2</sup>, VIRGINIA H. ARANDA<sup>1</sup>,  
MANUEL SÁNCHEZ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional de San Juan

IMA, Facultad de Ingeniería,

Av. Lib. San Martín (Oeste) 1109

CPA: J5400ARL, San Juan, Argentina

<sup>2</sup>CONICET, Av. Rivadavia 1917, C.A.B.A., Argentina

(Recibido 3 de noviembre de 2017, para publicación 18 de diciembre de 2017)

**Resumen** – En este trabajo se presenta un modelo termo-metalúrgico con el cual puede simularse las transformaciones difusionales y martensítica de la austenita en los aceros AISI 1040 y 4140 enfriados a diferentes velocidades. Las transformaciones de fase difusivas se simulan con los modelos de Kirkaldy-Venugopalan y *Li et al.*, la transformación martensítica se simula implementando la fórmula de Koistinen-Marburger. Los modelos metalúrgicos se acoplan a un modelo térmico resuelto mediante el método de los elementos finitos. Los resultados numéricos obtenidos son comparados con las curvas de enfriamiento sensadas en tres puntos ubicados a 3.45 mm, 13.5 mm y 51 mm de la base de una probeta Jominy; con los perfiles de dureza medidos en probetas Jominy, con las bandas de templabilidad y con un software comercial. Los acuerdos alcanzados entre los resultados numéricos y de las mediciones experimentales ponen de manifiesto la importancia y la capacidad de predicción del modelado termo-metalúrgico como así también su potencial para ser usado como herramienta de predicción en la industria de los tratamientos térmicos.

**Palabras clave** – Acero, termo-metalúrgico, austenita, AISI 1040, AISI 4140.

### 1. INTRODUCCIÓN

El ensayo Jominy es una de las técnicas más usadas para determinar la templabilidad y caracterizar una aleación metálica. Algunas de sus aplicaciones son: (i) la determinación de la templabilidad de una aleación, (ii) la predicción de los microconstituyentes que una aleación presentará en condiciones de enfriamiento estandarizadas y controladas, y (iii) la determinación de las propiedades mecánicas de las aleaciones tratadas térmicamente [1].

En el ensayo Jominy una probeta estandarizada y previamente normalizada (Fig. 1), es calentada y mantenida durante 30 min a 845°C, esto con el fin de obtener una estructura austenítica con un tamaño de grano específico (las temperaturas precisas de normalizado y de temple para diferentes aceros están especificadas en la Norma ASTM A255-02 [2]). Posteriormente la probeta es extraída de la mufla de tratamientos térmicos y dispuesta en un soporte, el cual permite que un flujo de agua incida en el extremo inferior de la probeta (la temperatura del agua, la distancia entre la base de la probeta y la sección de egreso del agua y su presión -altura del agua- también están especificados en la Norma ASTM A255-02), como se muestra en la Fig. 1. Enfriada la probeta, sobre su periferia se maquinan dos superficies planas y se pulen a espejo para trazar el perfil de dureza en los puntos indicados en la Norma ASTM A255-02 [2]. De esta manera, y a partir de la evaluación del perfil de dureza queda determinada la templabilidad de la aleación ensayada.

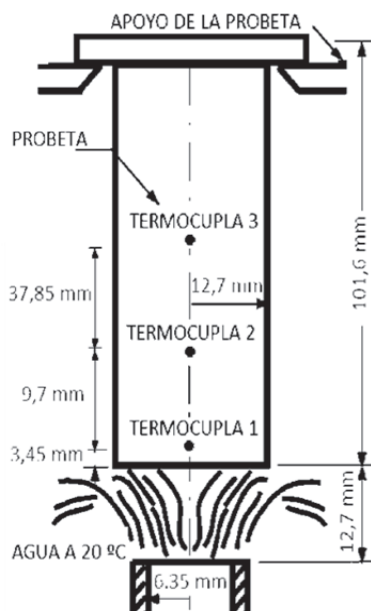


Fig. 1. Esquema de una probeta Jominy con las dimensiones y las posiciones de los puntos de sensado de la temperatura.

En el ensayo Jominy los puntos de la probeta enfrían a diferentes velocidades. La base de la probeta en contacto con el agua enfría a la mayor velocidad, y la cabeza de la probeta en contacto con el aire enfría a la menor velocidad, pasando por valores intermedios decrecientes desde la base a la cabeza de la probeta. Esto permite que mediante este ensayo, además de determinar la templabilidad de una aleación, pueda estudiarse y caracterizarse la respuesta de una aleación a velocidades de enfriamiento variables, los microconstituyentes resultantes, la dureza y el factor de templabilidad, entre otras propiedades no menos importantes.

Aprovechando la versatilidad del ensayo Jominy, en este trabajo se lleva a cabo la simulación termometalúrgica acoplada secuencialmente del ensayo Jominy de las aleaciones AISI 1040 y 4140. Los resultados obtenidos en tres puntos de la probeta (indicados en la Fig. 1), correspondientes a las curvas de enfriamiento, a las fracciones de los constituyentes y a la dureza son comparados con los obtenidos en los ensayos y con un software comercial (esto último solo en el AISI 4140).

## 2. METODOLOGÍA

### 2.1. Desarrollo Experimental

Para el ensayo se utilizaron los siguientes materiales y equipos:

1. Cinco Probetas de acero AISI 1040 y 4140.
2. Un horno mufla (Marca ORL VI con control digital de temperatura).
3. Un dispositivo para ensayos Jominy (de acuerdo a Norma ASTM A255 [2]).
4. Un equipo de medición de temperatura (la descripción se hace en los siguientes párrafos).

La composición química de los aceros se lista en la tabla 1. La misma fue determinada en el Instituto Argentino de Siderurgia con un Espectrómetro de emisión óptica Baird Spectrovac 2000.

A las cinco probetas mecanizadas se le practicaron seis orificios. Tres para alojar las termocuplas hasta el centro de las probetas, y tres (perpendiculares a los anteriores) para colocar los prisioneros de sujeción con los que se mantuvieron fijas las termocuplas en sus posiciones mientras las probetas fueron manipuladas y trasladadas desde el horno mufla hasta el dispositivo Jominy. En la Fig. 1, se muestra un esquema

Tabla 1. Composiciones químicas de las aleaciones empleadas en los ensayos Jominy (expresados en porcentaje en peso).

Elemento	1040	4140
<b>C</b>	0.39	0.38
<b>Mn</b>	0.69	0.87
<b>Si</b>	0.19	0.3
<b>P</b>	0.027	0.025
<b>S</b>	0.016	0.015
<b>Cr</b>	0.012	0.99
<b>Ni</b>	<0.012	0.091
<b>Mo</b>	0.010	0.16
<b>V</b>	0.003	0.05
<b>Cu</b>	0.008	0.036
<b>Nb</b>	-	0.008
<b>Ti</b>	-	0.002
<b>Al</b>	0.006	0.036

de una vista plana de una probeta Jominy con la indicación aproximada de los tres puntos en los que se sensó la temperatura.

Para el registro de las curvas de enfriamiento se emplearon termocuplas tipo K y fichas compensadas mini K. Para evitar que los cables hicieran contacto, los alambres fueron revestidos con bifilares de cerámica. Se utilizaron acondicionadores de señal Wika T91.03.232 para termocuplas K, los que se conectaron a una placa de adquisición National Instruments de ocho canales y de 16 bits, la cual se conectó a una notebook mediante un cable USB. Finalmente, para convertir la señal medida a temperatura, se desarrolló un programa en el entorno LabView.

El ensayo de microdureza se realizó con un Microdurómetro Shimadzu. En los ensayos se empleó una pesa de 200 gr y un tiempo de aplicación de la carga de 15 s. Para el análisis metalográfico se realizaron cortes transversales en las secciones donde se colocaron las termocuplas (Fig. 1). Las muestras fueron pulidas y atacadas con reactivo Nital 2% para su posterior análisis en un microscopio óptico Olympus.

## 2.2. Modelado termo-metalúrgico

### 2.2.1. Modelo térmico

Las principales hipótesis del modelo del enfriamiento empleado en este trabajo son:

- la pieza se considera un medio isótropo
- la energía generada o absorbida debido al trabajo mecánico es despreciable
- la energía generada durante los cambios de fase se debe a las transformaciones de fase que ocurren durante el enfriamiento continuo de la aleación.

Adoptando como energía interna específica la entalpía [3], no teniendo en cuenta fuentes de generación y absorción de calor interna y empleando para el flujo de calor a través de un cuerpo  $B$  (ver Fig. 2) una ley constitutiva del tipo *Fourier*, la ecuación de energía puede expresarse como:

$$\rho_0 c_p \dot{T} + \rho_0 L \dot{f}_{pc} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) \quad (1)$$

donde  $\rho_0$  es la densidad para la configuración de referencia del cuerpo  $B$ ,  $c_p$  es su capacidad calorífica,  $L$  es el calor latente de cambio de fase,  $f_{pc}$  es la función de cambio de fase y  $k$  es la conductividad térmica. Los puntos sobre las letras representan la derivada temporal y  $\nabla(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial x$  es el operador.

La Ecuación 1 deberá satisfacer las restricciones impuestas sobre el contorno,  $\partial\Omega$ , dadas por:

$$T = \bar{T} \text{ en } \Gamma_T \times Y \quad (2)$$

$$q \cdot n = -q \text{ en } \Gamma_c, \Gamma_q, \Gamma_g \times Y \quad (3)$$

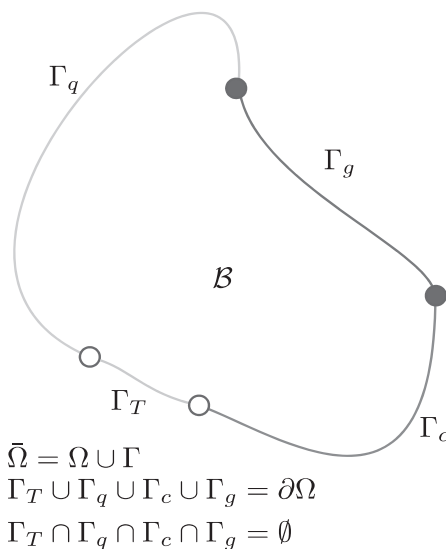


Fig. 2. Esquema de un medio continuo conductor de calor  $B$  con diferentes condiciones de contorno (temperatura impuesta ( $\Gamma_T$ ), flujo impuesto ( $\Gamma_q$ ), convección y radiación ( $\Gamma_c$ ) y contacto térmico ( $\Gamma_g$ ) en un problema de cambio de fase.

Y la condición inicial:

$$T(x, t)|_{t=0} = T_0(x) \text{ en } \Omega \quad (4)$$

donde  $\Omega$  es el dominio y  $\Gamma_T$ ,  $\Gamma_q$ ,  $\Gamma_c$  y  $\Gamma_g$  (Ecuaciones 2 y 3 respectivamente), corresponden a las partes del contorno de  $\Omega$  ( $\partial\Omega$ ). La temperatura  $\bar{T}$ , el flujo  $\bar{q}$ , o la convección y la radiación  $q_c$ , están prescritos. Desglosando el flujo  $q$  presente en el segundo miembro de la condición de contorno 4, se tiene que:

$$q^* = \begin{cases} \bar{q} & ; \forall x \in \Gamma_q \times Y \\ q_c & ; \forall x \in \Gamma_c \times Y \\ q_g & ; \forall x \in \Gamma_g \times Y \end{cases} \quad (5)$$

La Ecuación 1 junto con las restricciones 2, 3 y 4, permiten calcular  $T \forall x \in \Omega \times Y$  y constituyen la formulación fuerte del problema de valores iniciales y de contorno de transferencia de calor en un medio continuo con cambio de fase.

### 2.2.2. Modelo metalúrgico

En este trabajo se modelan las transformaciones difusivas y displasivas durante el ensayo Jominy de dos aleaciones. Los modelos metalúrgicos de los cambios de fase se obtienen a partir de la expresión propuesta por Kirkaldy y Venugopalan [4].

$$\tau(X, T) = \frac{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo, G)}{\Delta T^n \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)} I(X) \quad (6)$$

donde  $X$  es la fracción volumétrica del constituyente.

La Expresión 6 fue desarrollada para enfriamientos isotérmicos. La forma diferencial de dicha ecuación, para las transformaciones ferríticas, perlíticas y bainíticas, queda:

$$\frac{dX_f}{dt} = \frac{2^{\frac{G-1}{2}} * (Ac_3 - T)^3 * \exp\left(-\frac{23500}{R(T+273)}\right) * (X^{0.66(1-X)} * (1-X)^{0.66X})}{59.6 * Mn + 1.45 * Ni + 67.7 * Cr + 244 * Mo} \quad (7)$$

$$\frac{dX_p}{dt} = \frac{2^{\frac{(G-1)}{2}} * (Ac_1 - T)^3 * D * (X^{0.66(1-X)} * (1-X)^{0.66X})}{1.79 + 5.42 * (Cr + Mo + 4 * Mo * Ni)} \quad (8)$$

$$\frac{dX_b}{dt} = \frac{2^{(G-1)/2} * (B_s - T)^2 * \exp\left(-\frac{23500}{R(T+273)}\right) * \left(\frac{X^{0.66(1-X)} * (1-X)^{0.66X}}{\exp(A * X^2)}\right)}{(2.34 + 10.1 * C + 3.8 * Cr + 19 * Mo) * 10^{-4}} \quad (9)$$

La regla de aditividad se expresa como:

$$dX_{F_2}^N = X_{F_1}^N + \frac{dX}{dt} \Delta t \quad (10)$$

En la cual  $X_{F_2}^N$  es la fracción normalizada en el paso de tiempo  $t + \Delta t$ ,  $X_{F_1}^N$  es la fracción normalizada en el paso de tiempo  $t$ ,  $dX/dt$  es el incremento de la fracción de fase correspondiente calculado en  $X = X_{F_1}^N$  y  $\Delta t$  es el paso de tiempo empleado en los cálculos. Luego, la fracción normalizada puede ser convertida en la fracción real usando la siguiente relación,

$$X_{F_1}^R = X_{F_1}^N X_{FE}(T_1) \quad (11)$$

donde  $X_{F_1}^{NR}$  es la fracción real,  $X_{F_1}^N$  es la fracción normalizada y  $X_{FE}$  es la fracción de equilibrio a la temperatura  $T_1$ .

El modelo propuesto por Li *et al.* [5] tiene la misma forma que el modelo propuesto por Kirkaldy y Venugopalan [4]. La diferencia radica en los coeficientes, que en el caso de Li *et al.* fueron calibrados con diagramas CCT. Las Ecuaciones 12 a 17 describen el modelo desarrollado por Li *et al.* y se implementaron de la misma forma que las expresiones deducidas por Kirkaldy y Venugopalan.

$$\tau(X, T) = \frac{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo, G)}{\Delta T^n * \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)} S(X) \quad (12)$$

donde  $X$  es la fracción volumétrica del constituyente.

$$S(X) = \int_0^X \frac{dX}{X^{0.4(1-X)} * (1-X)^{0.4X}} \quad (13)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\Delta T^n * \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) * X^{0.4(1-X)} * (1-X)^{0.4X}}{F(C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo, G)} \quad (14)$$

$$\frac{dX_f}{dt} = \frac{2^{0.41G} * (Ac_3 - T)^3 * \exp\left(-\frac{27500}{RT}\right) * (X^{0.4(1-X)} * (1-X)^{0.4X})}{\exp(1 + 6.31C + 1.78Mn + 0.31Si + 1.12Ni + 2.7Cr + 4.06Mo)} \quad (15)$$

$$\frac{dX_p}{dt} = \frac{2^{0.32G} * (Ac_1 - T)^3 * \exp\left(-\frac{27500}{RT}\right) * (X^{0.4(1-X)} * (1-X)^{0.4X})}{\exp(-4.25 + 4.12C + 4.36Mn + 0.44Si + 1.71Ni + 3.33Cr + 5.19\sqrt{Mo})} \quad (16)$$

$$\frac{dX_b}{dt} = \frac{2^{0.29G} * (B_s - T)^2 * \exp\left(-\frac{27500}{RT}\right) * (X^{0.4(1-X)} * (1-X)^{0.4X})}{\exp(-10.23 + 10.18 + 0.85Mn + 0.55Ni + 0.90Cr + 0.36Mo)} \quad (17)$$

La transformación martensítica se modeló con la expresión propuesta por Koistinen y Marburger [6].

$$X_M = 1 - e^{-0.11(M^S - T)} \quad (18)$$

Obtenidas las fracciones de los microconstituyentes, se calcula la dureza en cada punto de la probeta Jominy empleando la regla de las mezclas propuesta por Hill [7].

$$Hv = X_M Hv_M + X_B Hv_B + (X_F + X_P) Hv_{F+P} \quad (19)$$

donde  $H_v$  es la microdureza (en Vickers);  $X_f$ ,  $X_p$ ,  $X_B$  y  $X_M$  son las fracciones volumétricas de ferrita, perlita, bainita y martensita respectivamente (varían punto a punto); y  $H_{vf}$ ,  $H_{vp}$ ,  $H_{vB}$  y  $H_{vM}$  son las durezas de la ferrita, perlita, bainita y martensita respectivamente. Estas ecuaciones empíricas fueron desarrolladas por Maynier *et al.* [8] y se expresan como:

$$Hv_{(F+P)} = 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 12.6 + 7Cr + 19Mo + (10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V) * \log \dot{T} \quad (20)$$

$$Hv_B = -323 + 185C + 330Si + 153Mn + 65Ni + 144Cr + 191Mo + (89 + 53C - 55Si - 22Mn - 10Ni - 20Cr - 33Mo) * \log \dot{T} \quad (21)$$

$$Hv_M = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 8Ni + 16Cr + 21 * \log \dot{T} \quad (22)$$

donde  $\dot{T}$  es la velocidad de enfriamiento a 704°C -en °C/h- de la probeta esquematizada en la vista plana de una probeta Jominy mostrada en la Fig. 1.

### 2.2.3. Descripción de los casos simulados

#### Malla de elementos finitos

En la Fig. 3 se muestra la discretización espacial del continuo (malla de elementos finitos). La misma corresponde a un modelo axial-simétrico de la probeta esquematizada en la vista plana de una probeta Jominy mostrada en la Fig. 1. En las simulaciones se emplearon dos mallas. Una para comparar las temperaturas en los puntos 1, 2 y 3 con los puntos indicados en la Fig. 1, esta tiene 392 nodos y 330 elementos (ver Fig. 3(a)). La segunda malla se empleó para comparar microdurezas en los puntos Jominy que están ubicados 1/16" hasta 1" (desde la base de la probeta), y cada 1/8" hasta las 2", esta tiene 541 nodos y 464 elementos (ver Fig. 3(b)).

#### Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales para los dos casos simulados (aceros AISI 1040 y 4140) es de 877°C respectivamente. Este valor se define en función de la composición química de las aleaciones estudiadas (ver Tabla 1) y la Norma ASTM A255-02 (Ref. [2]) y corresponde a la condición inicial indicada en la Expresión 4 (valor  $T_0(x)$ ).

#### Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno contempladas en el modelo se indican en la Fig. 3(c) y corresponden a: (i) la base de la probeta, donde incide el chorro de agua (ver esquema indicativo del proceso Jominy en la Fig. 1 e indicación en la Fig. 3(c)), y (ii) superficies laterales y superior en contacto con el aire ambiente.

Para el cálculo del coeficiente de conductancia en la base de la probeta (en contacto con el flujo de agua) se utilizó la correlación propuesta por Hömberg D. [9] posteriormente modificada en función de la distancia radial por Le Masson *et al.* [10].

$$h(T) = -0.0977 \times T^2 + 108 \times T - 1670 \frac{W}{m^2 \times K} \quad (23)$$

$$\alpha(r) = -5 \times 10^{-5} \times r^5 + 0.0017 \times r^4 - 0.0187 \times r^3 + 0.0571 \times r^2 + 0.1367 \times r + 0.4076 \quad (24)$$

$$h(r, T) = h(T) \times \alpha(r) \quad (25)$$

El coeficiente de la Expresión 25 se emplea en el cálculo de la Expresión 3. Con  $q_c = q_g = 0$  en  $\Gamma_q \times Y$  y  $\bar{q}$  dado por:

$$q = h(r, T)(T_p - T_{agua}) \quad \text{en } \Gamma_q \times Y \quad (26)$$

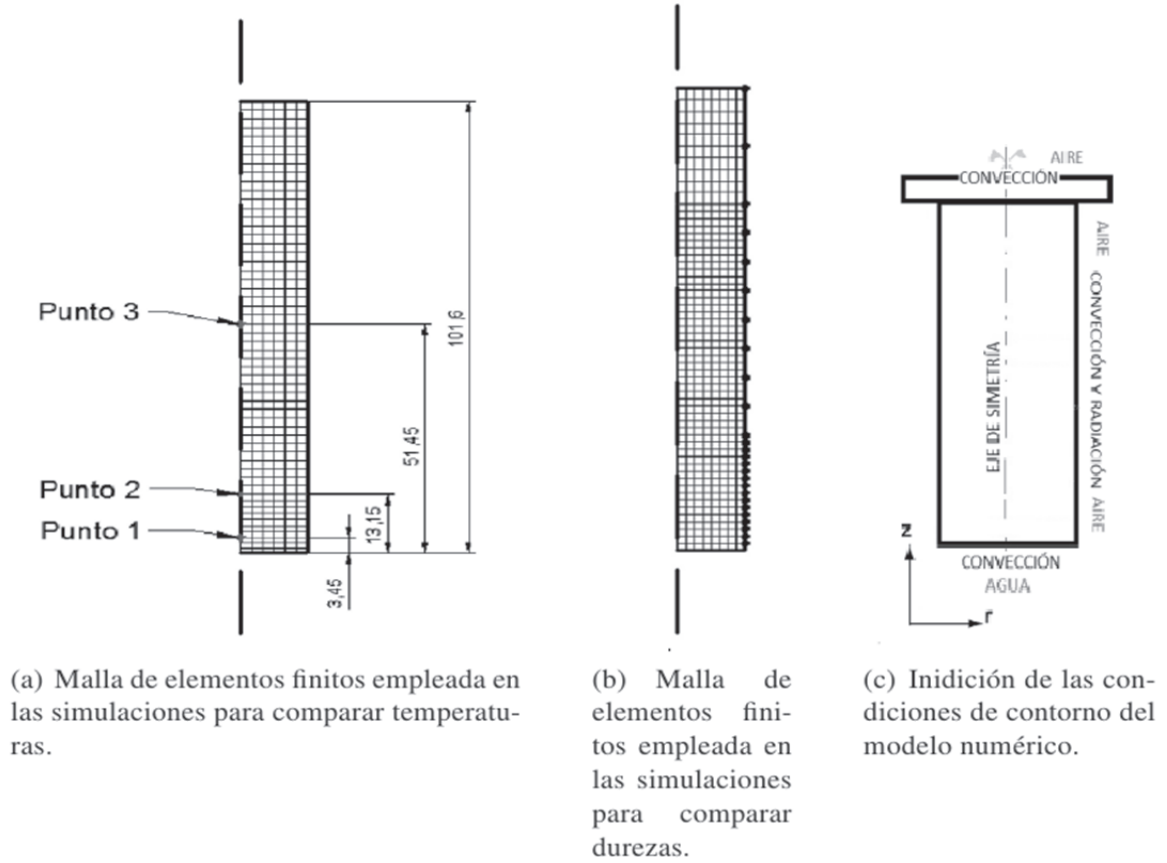


Fig. 3. Mallas empleadas en las simulaciones y esquema de la probeta con las condiciones de contorno.

donde  $T_p$  y  $T_{agua}$  son las temperaturas en los puntos de la base de la probeta (en el modelo -ver Fig. 2- corresponde a los puntos  $\forall x \in \Gamma_q$ ) y del agua respectivamente (a la cual se la considera igual a la temperatura ambiente sensada en el momento en que se llevaron a cabo los ensayos, 27°C). En las superficies lateral y superior de la probeta se considera que existe transporte de energía por convección y radiación (ver Fig. 3(c)), estando la condición de contorno en las paredes lateral y superior dada por:

$$q_c = h_c(T_p - T_\infty) + \sigma(T_p^4 - T_\infty^4) \text{ en } \Gamma_q \times Y \quad (27)$$

donde  $h_c$  es el coeficiente de convección,  $T_p$  y  $T_\infty$  son las temperaturas en los puntos de la superficie lateral y de la cabeza de la probeta (en el modelo -ver Fig. 2- corresponde a los puntos  $\forall x \in \Gamma_c$ ) y en el aire alejado de dichas superficies respectivamente (igual a 27°C),  $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} (W/m^2 K^4)$  es la constante de Stefan-Boltzmann y  $\epsilon$  la emisividad, para la cual se adoptó un valor de 0.8 (Le Masson *et al.*, 2002). Operando la expresión 27 se llega a:

$$q_c = h_{rc}(T_p - T_\infty) \text{ en } \Gamma_q \times Y \quad (28)$$

donde  $h_{rc}$  es el coeficiente de transferencia de calor integrado [11]. El flujo de calor  $q_c$  está presente en el cálculo de la expresión 5. Con  $\bar{q}_g = 0$  en  $\Gamma_c \times Y$ .

De las variables y coeficientes presentes en la expresión 27, resta determinar el valor de  $h_c$ . Para el cálculo del mismo se utilizó la expresión propuesta por Incropera *et al.* [12]:

$$h_c = \frac{k}{l} \left[ \frac{g \beta (T_p - T_\infty)}{4 \nu^2} \right]^{1/4} g(Pr) \int_0^l \frac{dx}{x^{1/4}} \quad (29)$$

Tabla 2. Propiedades termo-físicas de los aceros empleadas en las simulaciones.

temperatura °	conductividad [ $J/sm^{\circ}C$ ]
100	42.6
200	42.2
400	37.7
600	C 33
temperatura °C	calor específico [ $kJ/kg$ ]
150-350	473
350-400	519
550-600	561
densidad [ $kg/m^3$ ]: 7850	

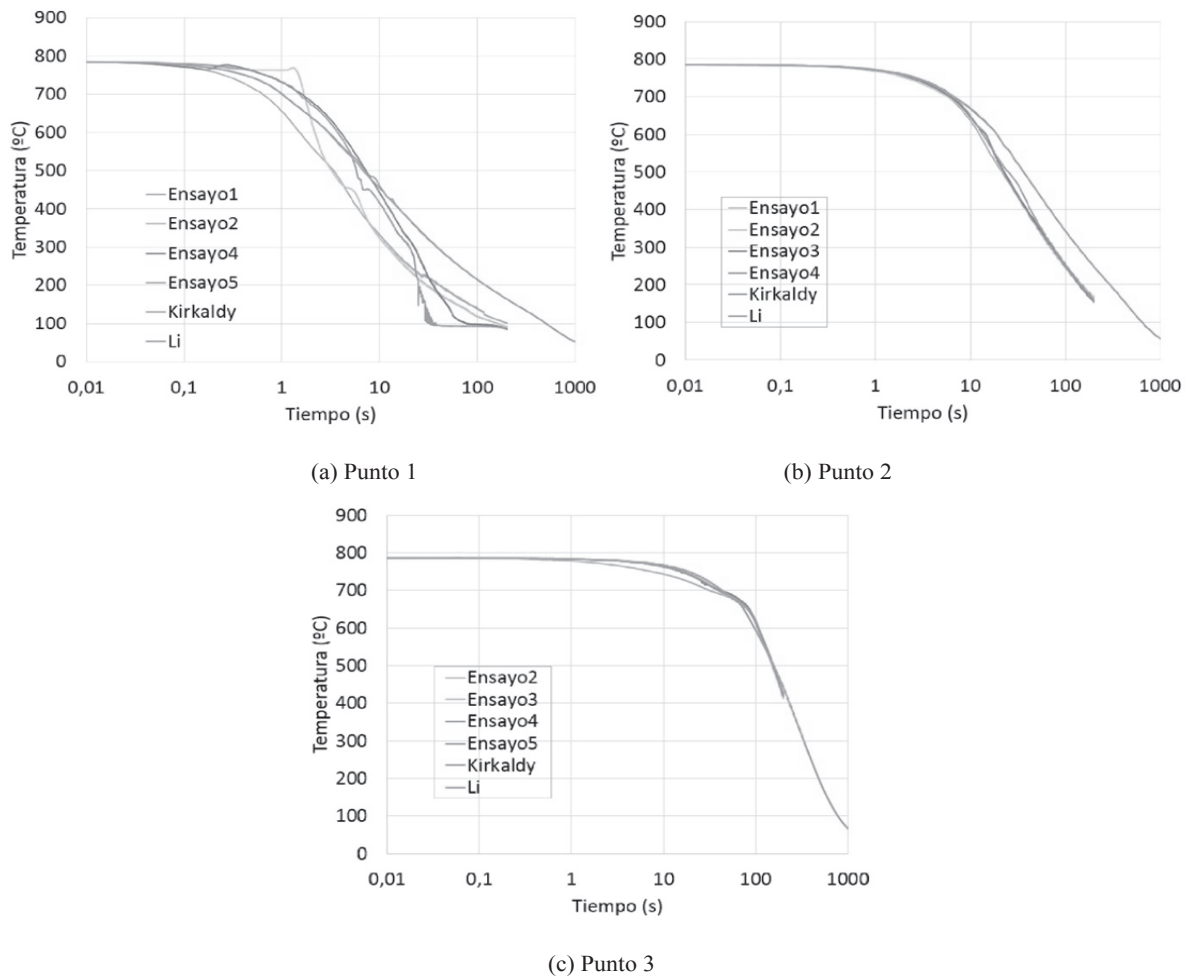


Fig. 4. Curvas de enfriamiento simuladas y experimentales en los puntos 1, 2 y 3 indicados en la Fig. 1 de la aleación AISI 1040.

donde  $k$  es la conductividad térmica,  $l$  es la longitud de la pared,  $g$  es la aceleración de la gravedad,  $\beta$  es el coeficiente de expansión volumétrica,  $(T_p - T_{\infty})$  es la diferencia entre el valor de la temperatura en la



pared y en el aire respectivamente,  $\nu$  es la viscosidad cinemática del aire y  $g(Pr)$  es el gradiente temperatura (adimensional). El valor del coeficiente de convección calculado mediante la Expresión 29 resulta entonces:

$$h_c = 10.18 \text{ W/(mK)} \quad (30)$$

Los calores latentes de los constituyentes empleados en las simulaciones son los publicados por Buchmayr y Kirkaldy [13] esto es:  $Q_f = 5,9 \times 10^8 \text{ (J/m}^3\text{)}$ ,  $Q_p = 6 \times 10^8 \text{ (J/m}^3\text{)}$ ,  $Q_b = 6,2 \times 10^8 \text{ (J/m}^3\text{)}$  y  $Q_m = 6,5 \times 10^8 \text{ (J/m}^3\text{)}$ .

Finalmente, en la tabla 2 se indican los valores de las propiedades termofísicas correspondientes a los aceros AISI 1040 y 4140 usadas en las simulaciones.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### 3.1. AISI 1040

En la Fig. 4 se muestran las curvas de enfriamiento experimentales y simuladas correspondientes a los puntos 1-3 (ver Fig. 1). En todos los puntos se han logrado buenos acuerdos entre los valores simulados y los sensados en el laboratorio, siendo las velocidades de enfriamiento (derivadas con respecto al tiempo de las curvas mostradas en la Fig. 4) mayores en los puntos cercanos a la base de la probeta (en contacto con el agua) que hacia la cabeza de la probeta.

En la Fig. 5 se grafican las fracciones de los microconstituyentes al final de enfriamiento obtenidas con los modelos de Kirkaldy y Venugopalan [4] y Li *et al.* [5]. Al comparar las fracciones de los microconstituyentes, se observa que el modelo de Kirkaldy y Venugopalan tiende a dar mayores porcentajes de fases resultantes de transformaciones difusivas, en tanto el modelo de Li *et al.* da fracciones mayores de constituyentes de origen atómico. En ambos modelos las fracciones de los microconstituyentes de origen atómico tienden a aumentar a medida que aumenta la velocidad de enfriamiento. Al observar la distribución del microconstituyente bainita, se observa que el modelo de Li *et al.* tiende a dar una fracción menor que el modelo de Kirkaldy y Venugopalan y una mayor fracción del constituyente martensita.

En la Fig. 6 se grafican las bandas de templabilidad del acero IRAM 1038 [14], junto a los perfiles de dureza calculados con los modelos de Kirkaldy y Venugopalan y de Li *et al.* El perfil de dureza obtenido con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan cae fuera de la banda de templabilidad en los puntos o zonas cercanas a la base de la probeta, esto se debe a los bajos porcentajes de martensita obtenidos con este modelo (ver Fig. 5(a) y 5(b)), recién en puntos ubicados a distancias de la base a las cuales les corresponden constituyentes de origen difusional, y parcialmente difusional y atómico, perlita y bainita respectivamente, el perfil de dureza obtenido con los valores de las fracciones de los microconstituyentes calculados con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan se encuentran dentro de la banda de templabilidad. El perfil de dureza calculado con las fracciones de los microconstituyentes obtenidas con el modelo de Li *et al.* está dentro de las bandas de templabilidad hasta la distancia reportada por el manual IAS (1987) (este manual no reporta valores de dureza más allá de estos puntos debido a la baja templabilidad de este acero). En el caso de los valores experimentales, solo los valores del ensayo 2 (dos) caen fuera de la banda de templabilidad, al observar la curva de enfriamiento correspondiente al punto 1 (ver Fig. 4(a)) se ve que las condiciones de enfriamiento, y por lo tanto de los constituyentes de origen atómico, no corresponden a los que debería obtenerse para puntos ubicados en zonas próximas a la base de la probeta.

#### 3.2. AISI 4140

En este caso, al igual que en los resultados experimentales y numéricos correspondientes al acero AISI 1040 (ver Sección 3.1), se logró un buen acuerdo entre las curvas de enfriamiento simuladas y experimentales. Éstas se muestran en la Fig. 7 para los puntos 1-3 (indicados en la Fig. 1).

En la Fig. 8 se grafican las fracciones de los microconstituyentes al final de enfriamiento obtenidas con los modelos presentados en la Sección 2.2.2. Las fracciones de los constituyentes correspondientes al modelo de Kirkaldy y Venugopalan (1983), en su mayoría son ferrítica-bainítica, reportando martensita solo en puntos ubicados a menos de 1/2" de la base templada. En el caso de los resultados correspondien

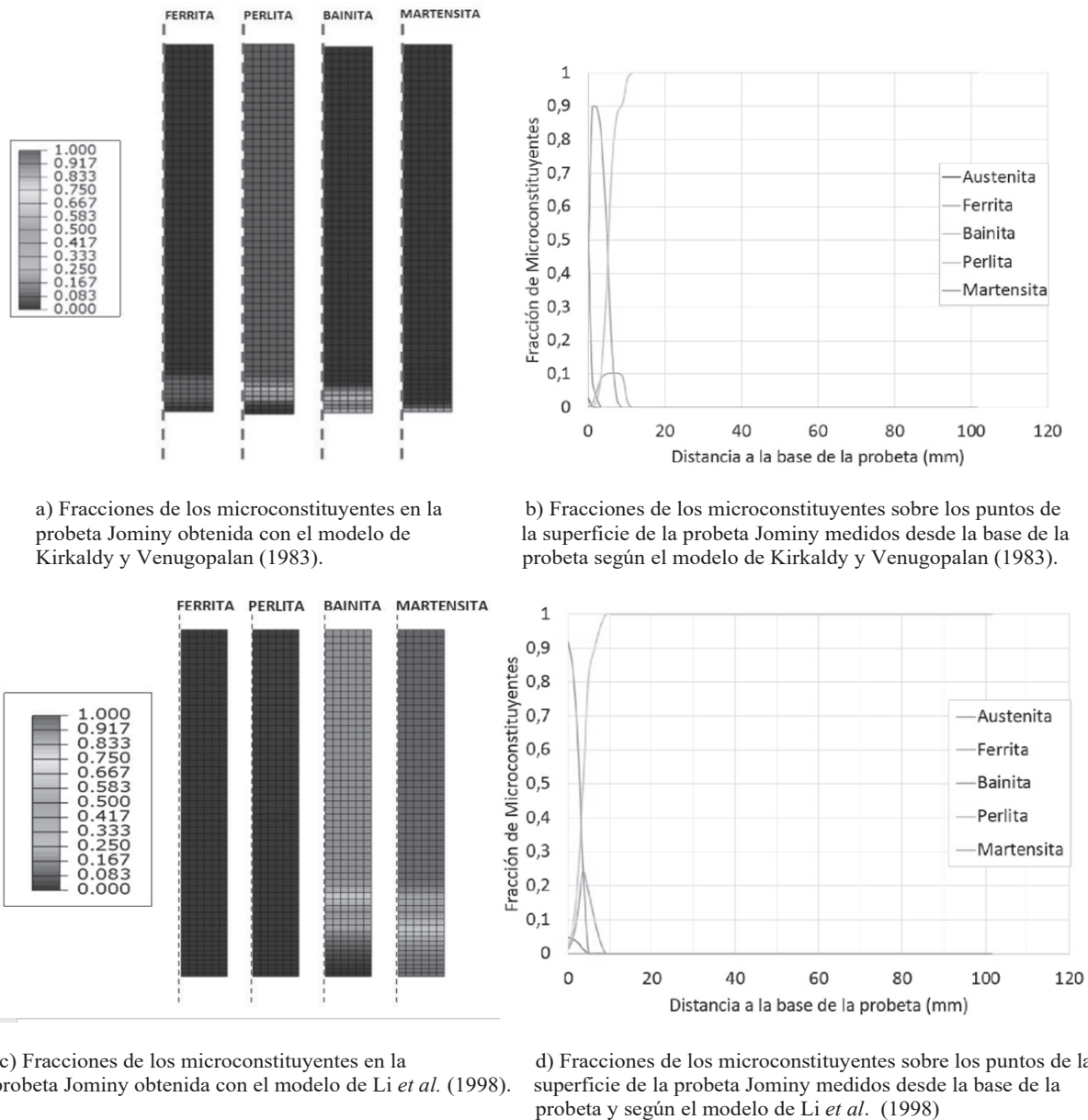


Fig. 5. Fracción de los microconstituyentes en la probeta Jominy.

tes al modelo de Li *et al.*, puede observarse que la totalidad de los puntos de la probeta Jominy reportan estructuras de fase dual bainíticas-martensíticas, teniendo fracciones de martensita diferentes de cero en puntos ubicados a 1" de la base de la probeta Jominy.

En la Fig. 9 se grafican las bandas de templabilidad del acero IRAM 4140 extraídas de IAS (1987), el perfil de dureza obtenido con la versión de prueba del software comercial JMatpro y los perfiles de dureza calculados con el modelo metalúrgico presentado en la Sección 2.2.2. Al igual que en el caso del Acero AISI 1040 (ver análisis al final de la Sección 3.1 y Fig. 6), en el perfil de dureza obtenido con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan en la zona cercana a la base de la probeta los valores de dureza caen fuera de la banda de templabilidad, esto se debe a los bajos porcentajes de martensita obtenidos con este modelo (ver Fig. 8(a) y 8(b)). En puntos ubicados a distancias de la base en los cuales es más probable encontrar

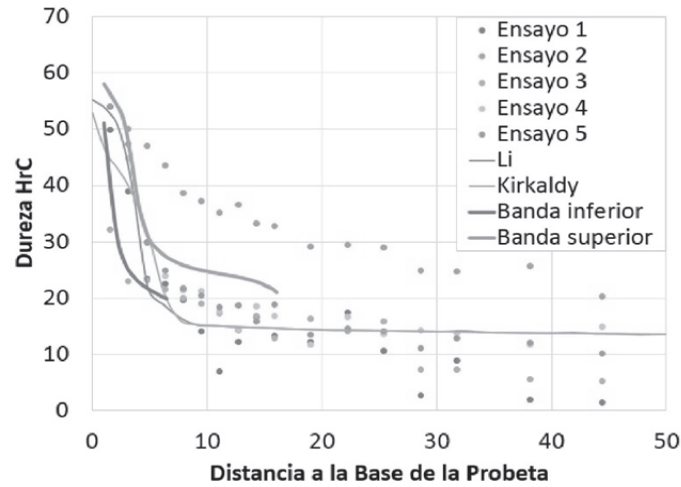


Fig. 6. Perfiles de dureza simulados y experimentales.

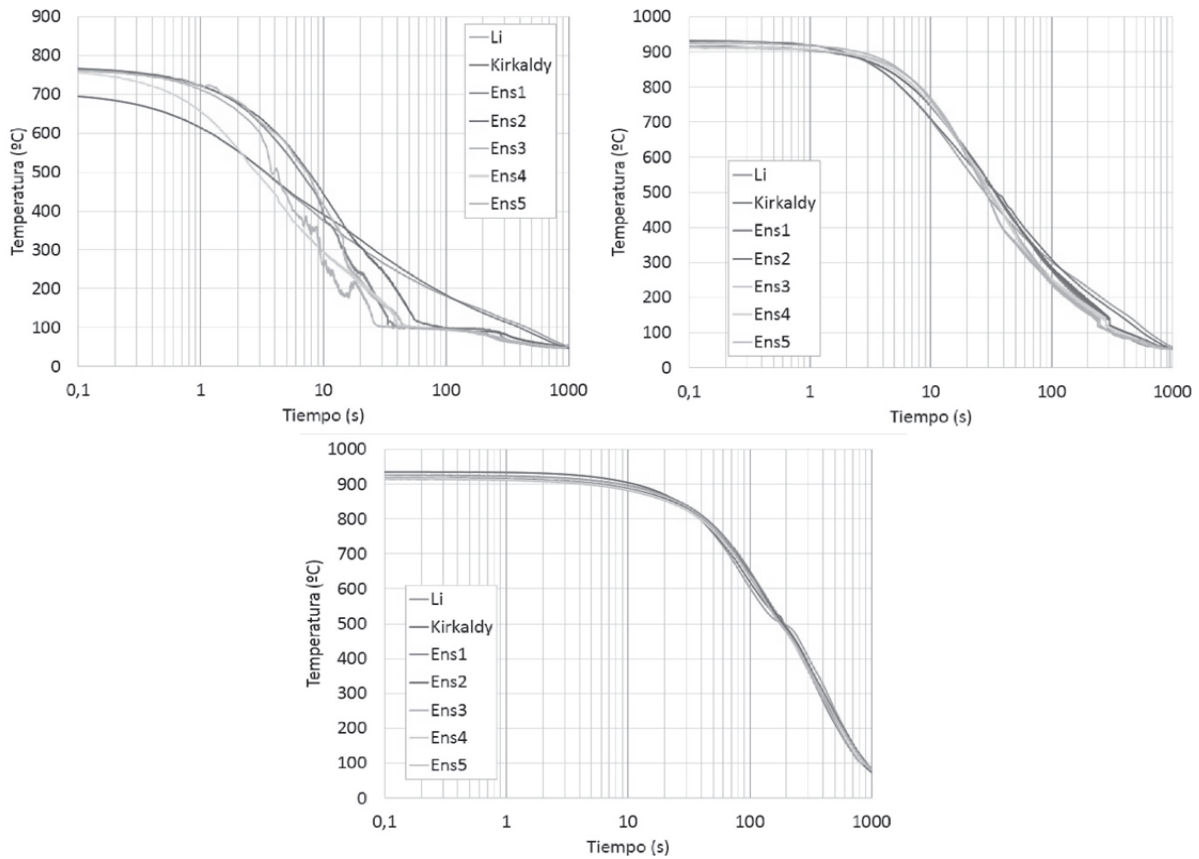
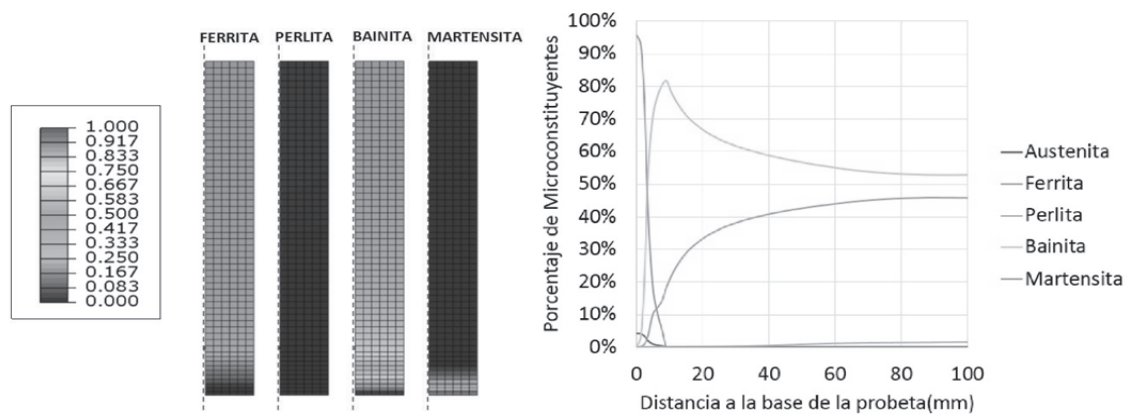


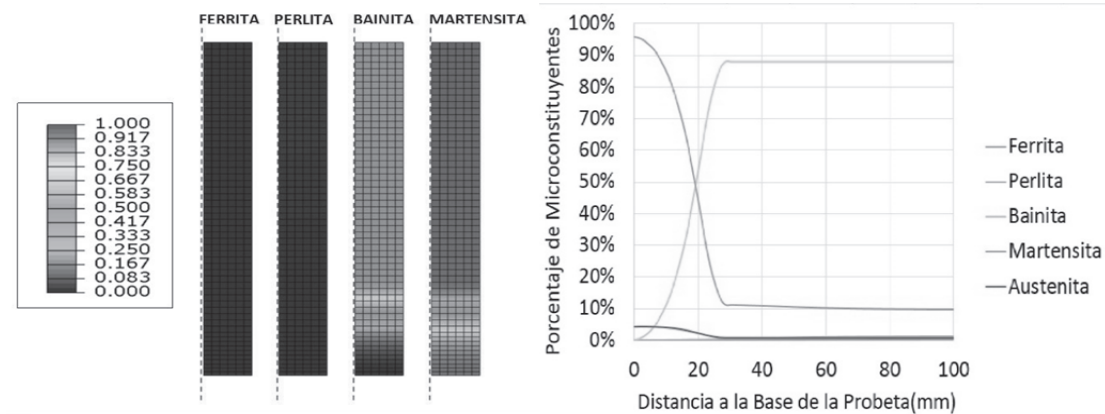
Fig. 7. Curvas de enfriamiento simuladas y experimentales en los puntos 1, 2 y 3 indicados en la Fig. 1 de la aleación AISI 4140.

constituyentes de origen difusional, y parcialmente difusional y atómico, perlita y bainita respectivamente, el perfil de dureza calculado con las fracciones de los microconstituyentes obtenidos con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan se encuentran dentro de la banda de templabilidad. El perfil de dureza calculado con las fracciones de los microconstituyentes obtenidos con el modelo de Li *et al.* está dentro de



(a) Fracciones de los microconstituyentes en la probeta Jominy obtenida con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan (1983).

(b) Fracciones de los microconstituyentes sobre los puntos de la superficie de la probeta Jominy medidos desde la base de la probeta y obtenidos con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan (1983).



(c) Fracciones de los microconstituyentes en la probeta Jominy obtenida con el modelo de Li *et al.* (1998).

(d) Fracciones de los microconstituyentes sobre los puntos de la superficie de la probeta Jominy medidos desde la base de la probeta y obtenidos con el modelo de Li *et al.* (1998).

Fig. 8. Fracción de los microconstituyentes en los puntos de una probeta Jominy.

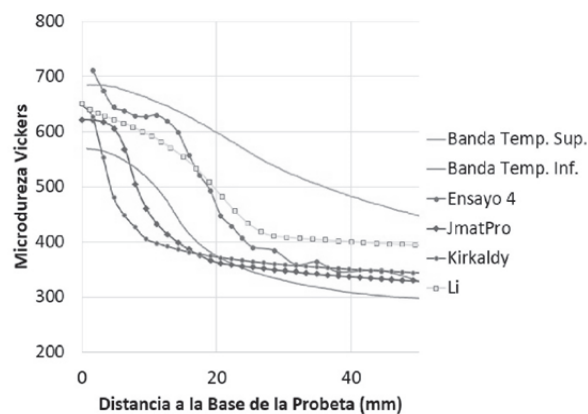


Fig. 9. Perfiles de dureza simulados y experimentales.

las bandas de templabilidad en la totalidad de los puntos considerados en el estudio. Al observar el resultado reportado por la versión de prueba del software empleado en los análisis, se observa que el mismo tiene la forma del perfil de dureza calculado con el modelo de Kirkaldy y Venugopalan, el cual no está comprendido en las bandas de templabilidad hasta una distancia de aproximadamente 2" desde la base de la probeta. En el caso de los valores experimentales, en el análisis llevado a cabo sólo se consideran los valores del ensayo 4 (cuatro), los cuales están comprendidos en la banda de templabilidad.

#### 4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se presentó un modelo termo-metalúrgico mediante el cual resultó posible incorporar, entre otros fenómenos y procesos desarrollados a nivel micro-estructural, la influencia de los cambios de fase en el modelo del enfriamiento de una probeta Jominy.

A partir del análisis llevado a cabo en la Sección 3, se observa que los resultados obtenidos son acordes a lo reportado en la bibliografía, esto es, al aumentar el contenido de Cr y Mo de la aleación:

- la templabilidad de la pieza aumenta
- la dureza aumenta
- el inicio de las transformaciones difusionales es retardado
- la velocidad crítica de temple disminuye
- los porcentajes de los microconstituyentes productos de los cambios de fase difusivos disminuyen

Respecto a los modelos implementados en este trabajo, el modelo de Kirkaldy y Venugopalan tiende a sobreestimar las fracciones de los microconstituyentes de origen difusional, obteniéndose perfiles de dureza que caen fuera de las bandas de templabilidad de los aceros estudiados en este trabajo, acrecentándose las diferencias a medida que los porcentajes de aleantes crecen. En tanto la implementación computacional del modelo de Li *et al.* en programas de simulación computacional permite contar con una valiosa herramienta con la cual pueden llevarse a cabo ensayos virtuales en el computador para diferentes piezas y medios y condiciones de enfriamiento.

Esto pone de manifiesto la importancia del modelado metalúrgico en piezas y partes tratadas térmicamente, ya que permiten predecir las fracciones de los microconstituyentes y, juntos con éstas, la dureza y resistencia de la pieza tratada.

#### REFERENCIAS

- [1] Smoljan, B., Prediction of mechanical properties and microstructure distribution of quenched and tempered steel shaft, *Journal of Materials Processing Technology*, **175**(1-3), 393–97 (2006)
- [2] ASTM A255-02. Standard test methods for determining hardenability of steel, *ASTM Book of ASTM Standards*, **03**(01), 1–24 (2002)
- [3] Shamsundar, N., Sparrow, E., “Analysis of multidimensional conduction phase change via enthalpy model”, *ASME Journal of Heat Transfer*, **97**, 333–340 (1975)
- [4] Kirkaldy, J.S., Venugopalan, D.V., “Prediction of microstructure and hardenability in low alloy steels”, En A. Marder y J.I. Goldstein, editores, *Proceedings of an International Conference on Phase Transformations in Ferrous Alloys*, 125–48. Metallurgical Society of AIME, Philadelphia, Pennsylvania, USA (1983)
- [5] Li, M.V., Niebuhr, D.V., Meekisho, L.L., Atteridge, D.G., “A computational model for the prediction of steel hardenability”, *Metallurgical Transactions B*, **29**(3), 661–72 (1998)
- [6] Koistinen, D., Marburger, R., “A general equation prescribing the extent of the austenite martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels”, *Acta Metallurgica*, **7**(1), 59–60 (1959)
- [7] Hill, R., “A self-consistent mechanics of composite materials”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **13**(4), 213–222 (1965)

- [8] Maynier, P., Dollet, J., Bastien, P., “Prediction of microstructure via empirical formulae based on cct diagrams”, En D.V. Doane y J.S. Kirkaldy, editores, *Hardenability Concepts with Applications to Steel*, 518–44. Metallurgical Society of AIME (TMS-AIME, Warrendale, PA), Ohio, USA (1978)
- [9] Hmberg, D., “A numerical simulation of the Jominy end-quench test”, *Acta Materialia*, **44**(11), 4375–85 (1996)
- [10] Le Masson, P., Loulou, T., Artioukhine, E., Rogeon, P., Carron, D., Quemener, J.J., “A numerical study for the estimation of a convection heat transfer coefficient during a metallurgical jominy end-quench test”, *International Journal of Thermal Sciences*, **41**(6), 517–27 (2002)
- [11] Chen, X., Xiao, N., Li, D., Li, G., Sun, G., “The finite element analysis of austenite decomposition during continuous cooling in 22MnB5 steel”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **22**(6), 1–16 (2014)
- [12] Incropera, F.P., DeWitt, D.P., Bergman, T.L., Lavine, A.S., *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Sexta edición (2007)
- [13] Buchmayr, B., Kirkaldy, J., “Modeling of the temperature field, transformation behavior, hardness and mechanical response of low alloy steels during cooling from the austenite region”, *Journal of Heat Treatment*, **2**(8), 127–36 (1990)
- [14] IAS. *Aceros de Construcciones Mecánicas. Hojas de Características*. IAS, segunda edición (1987)

## DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL TOOL FOR HARDNESS PREDICTION IN HEAT TREATED AISI 1040 AND 4140 STEELS

**Abstract** – This paper presents a thermo-metallurgical model which can simulate diffusional and displacive transformations of austenite in AISI 1040 and 4140 steels cooled at different rates. Diffusive phase transformations are simulated with Kirkaldy-Venugopalan model and Li et al. model. Martensitic transformation is simulated using Koistinen-Marburger formula. Metallurgical models are engaged to a thermal model solved with a finite elements method. Temperature changes obtained with the numerical model are compared with measured cooling curves in three different points: 3.45 mm, 13.5 mm and 51 mm from the base of a Jominy specimen. Hardness numerical results are contrasted with: a) hardness profiles measured on Jominy specimens b) hardenability bands and c) a commercial software. The agreement between numerical results and experimental measurements highlight the prediction ability of Thermo-metallurgical modelling as well as its potential to be used as a forecasting tool in the heat treatment industry.

**Keywords** – Steel, Thermo-metallurgical, Austenite, AISI 1040, AISI 4140.