

## Uso de simulações Calphad no desenvolvimento de ligas de alumínio

Quézia Andrade da Silva<sup>1</sup>, Cléber Rodrigo de Lima Lessa<sup>1</sup>, Fabiana Lopes da Silva<sup>1\*</sup>

Orientador(a)\*

<sup>1</sup>Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul (IFRS) - *Campus*  
Caxias do Sul. Caxias do Sul, RS.

A aplicação da termodinâmica computacional na previsibilidade dos processos metalúrgicos, tem avançado significativamente. Este avanço é impulsionado pela capacidade destas simulações em fornecerem dados e resultados de forma rápida, além de otimizarem o tempo que seria gasto em cálculos e experimentos que, de outra forma, seriam feitos manualmente. O software de simulação termodinâmica conhecido como ThermoCalc constitui um conjunto de programas computacionais baseados na metodologia CALPHAD. Esta metodologia oferece uma vasta base de dados e permite a construção de diagramas de fases e cálculos de equilíbrio termodinâmico. Este projeto de pesquisa tem como objetivo principal investigar a solidificação da liga AlSi12% em diferentes tipos de moldes e em diferentes condições de equilíbrio, correlacionando dados físicos com os obtidos nas modelagens computacionais do ThermoCalc. As simulações computacionais foram realizadas com a versão estudantil do software. A investigação se deu pela análise de curvas de resfriamento obtidas com modelos termodinâmicos computacionais para determinar os tempos de início e fim da solidificação, tanto no estado de equilíbrio quanto fora dele, além da evolução da fração de sólido e da formação de partículas de segunda fase. Os experimentos físicos incluíram cálculo e preparação da carga para fundição em cadinho de ferro fundido e de grafite, seguida da solidificação e monitoramento térmico do resfriamento nas condições de equilíbrio (em forno mufla) e fora do equilíbrio (ao ar). Em continuidade da pesquisa, os dados das simulações físicas e computacionais serão comparados para validar os modelos. Como resultados, espera-se grande semelhança ao medir a precisão das simulações computacionais em comparação com dados experimentais e da literatura. Desta forma, este estudo demonstrará a eficácia do software como parâmetro de controle da solidificação e da formação microestrutural, impulsionando sua utilização tanto acadêmica quanto industrial.

Palavras-chave: Termodinâmica computacional; Solidificação; Fundição.