

**TATA STEEL**



# Singularidades de la solidificación de aceros modeladas con ThermoCalc y su influencia en las propiedades mecánicas del producto.

Dr. Begoña Santillana

17 de Octubre de 2024 - ThermoCalc webinar

**Together we make the difference**

Tata Steel Nederland (Países Bajos)

**Nos conocen?**

# Tata Steel Nederland (TSN)

**23**

plantas en 9 países

**11,418**

empleados,  
approx. 40,000 trabajadores  
indirectos

**#2**

ranking mundial CO2-  
eficiente (productora de  
acero)

**€6.9 billion**

annual turnover FY21-22

**7m**

**toneladas**

produccion de acero anual  
en IJmuiden

**17,000**

diferentes productos

# Nuestros productos



**Industria automotriz**  
del chasis, a partes de seguridad de los pasajeros y panels externos.



**Packaging**  
latas de conservas y bebidas.



**Construcción**  
cimentación, estructuras de soporte, suelo y el revestimiento de edificios y fachadas.



**Maquinaria pesada y electrodomesticos**  
Desde máquinas en la construcción y la agricultura hasta lavadoras, sillas de oficina y contenedores de almacenamiento.

# Agenda

Introducción: algunos conceptos clave para el modelado de solidificación.

Modelado y ejemplos

- Cálculos termodinámicos
- Cálculos de microestructura

Conclusiones



# Introducción

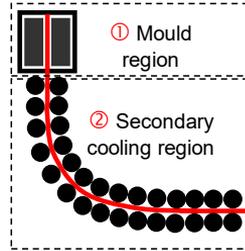
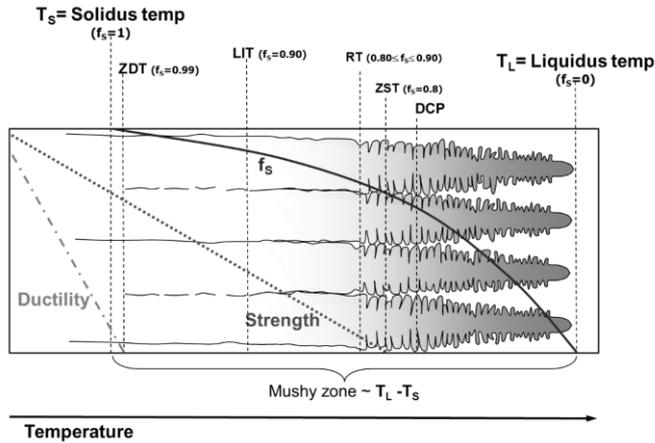
## Algunos conceptos clave

# Conceptos importantes

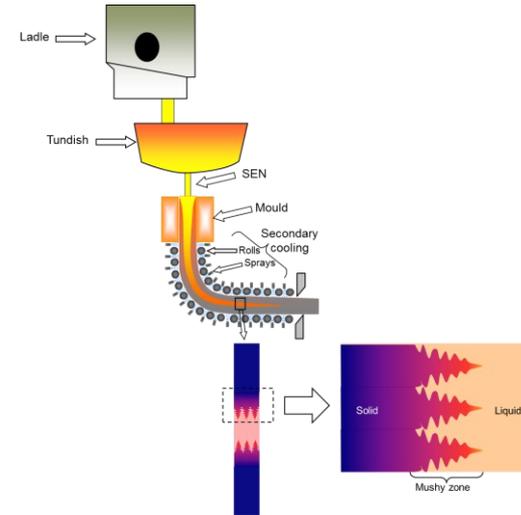
- La solidificación de un acero será una huella digital que marcará muchas propiedades del producto final.
  - Si un acero no puede ser colado, nunca será un producto final.
  - La cuestión no es si podemos fundir un acero o no, sino: ¿cómo podemos colarlo?...
- Hoy en día existen herramientas, modelos matemáticos y físicos, disponibles para ayudar a comprender el proceso de colada continua. Esas herramientas si se usan sabiamente, también se pueden usar para desarrollar y ayudar en el desarrollo de nuevos aceros.
  - ***¡Los modelos necesitan propiedades de los materiales!***
  - *El comportamiento termomecánico depende de cada grado de acero*
  - *La deformación durante la colada continua depende de los parámetros del proceso*

# “zonas” en la colada continua

(1) **Región del molde o inicio de solidificación:** el "rango de solidificación", entre temp de liquidus (alrededor de 1530°C a 1450°C) y la temp de solidus (alrededor de 1400°C a 1300°C). Se considera que la ductilidad y la fuerza comienzan entre 0,9 y 0,99 fracción de sólido ( $f_s$ ), lo que depende de la composición del acero.

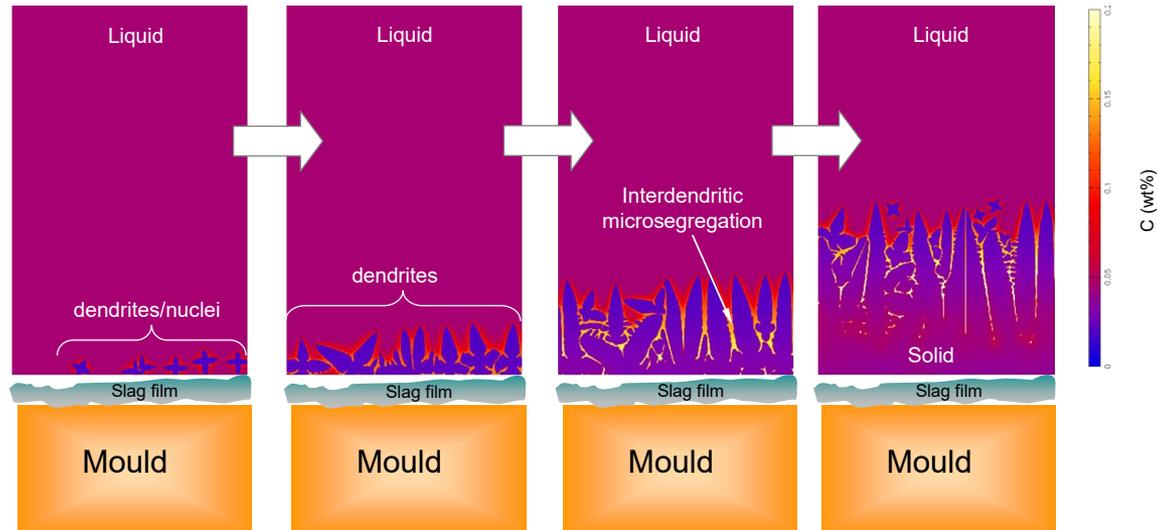


(2) **Región de enfriamiento secundaria:** un rango de temperatura más amplio (entre 1300°C a 700°C), incluye el “segunda reducción de ductilidad”. Pero la misma región semisólida se encuentra a lo largo de toda la colada, siguiendo la solidificación hasta el centro del producto.

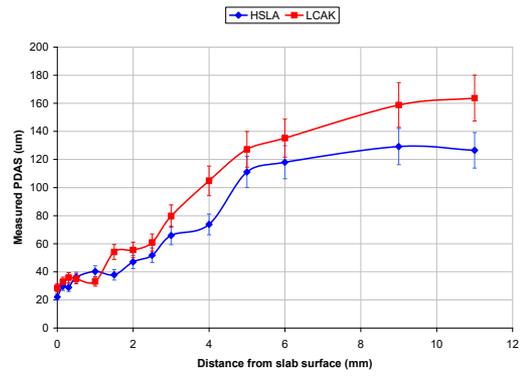
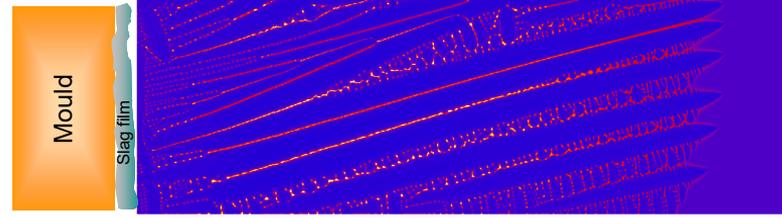
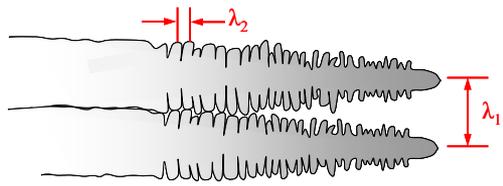


# Solidificación y segregación

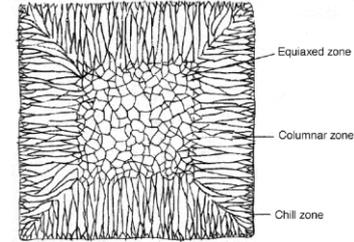
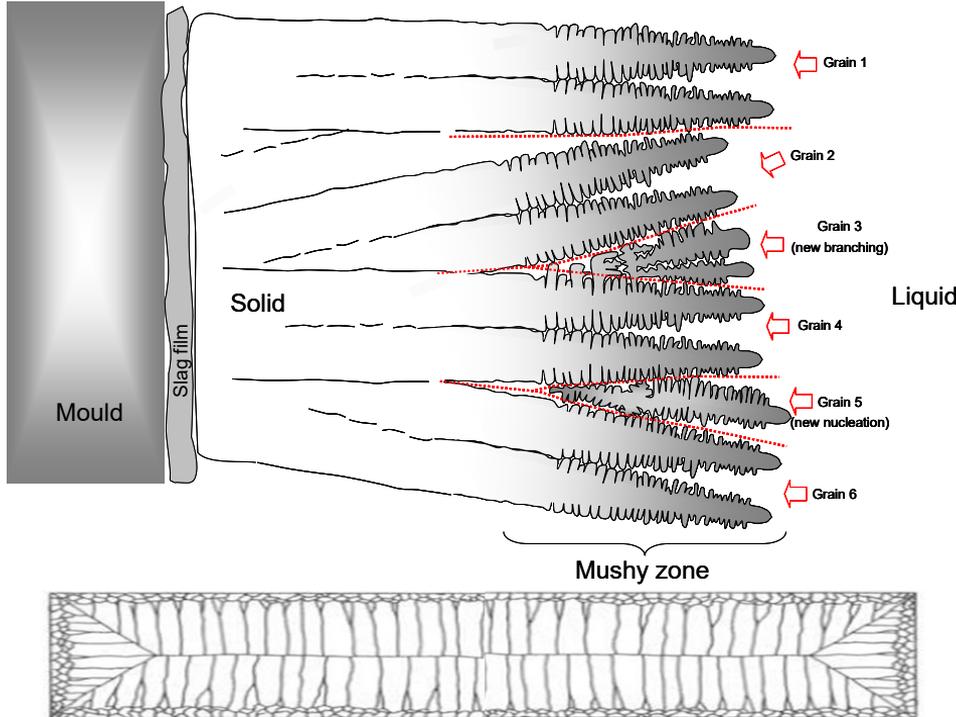
# Solidificación dendrítica



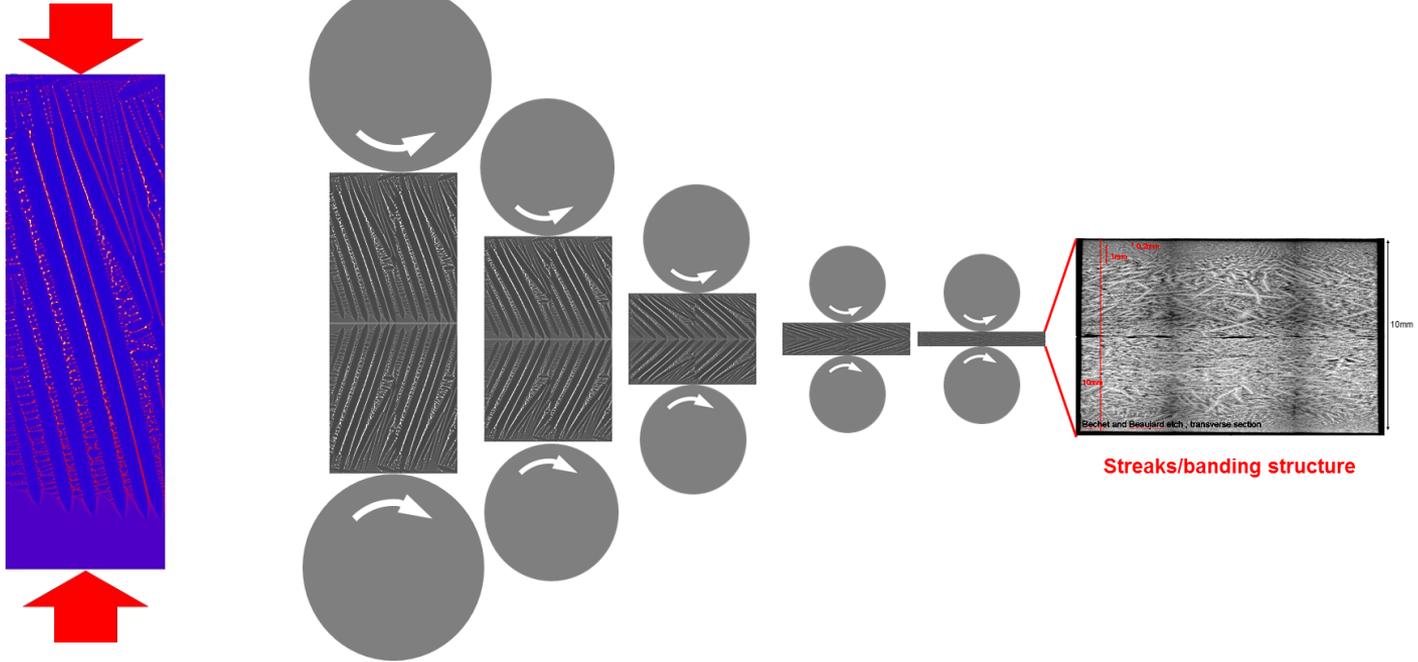
# Estructura dendrítica: ejemplo de planchón delgado



# De las dendritas a los granos -como es la estructura de colado.



# Desde la colada hasta el laminado....



# Opciones de modelado para la solidificación y la segregación

# CALPHAD & Siderurgia

Black & white

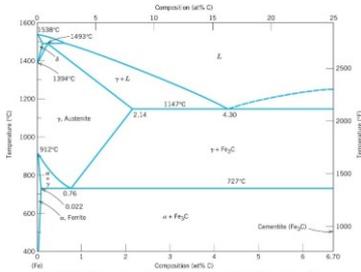
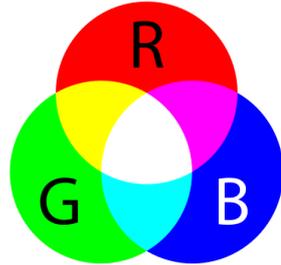


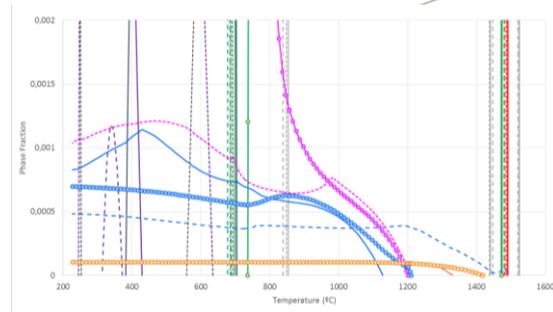
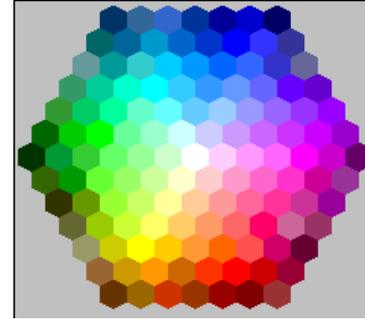
FIGURE 9.21 The iron-iron carbide phase diagram. [Adapted from *Binary Alloy Phase Diagrams*, 2nd edition, Vol. 1, T. B. Massalski (Editor-in-Chief), 1990. Reprinted by permission of ASM International, Materials Park, OH.]

16 colours



- **Carbon equivalent formulae**
- $C_p = [\%C] + X_{Mn}[\%Mn] + X_{Si}[\%Si] + \dots$

256 colours



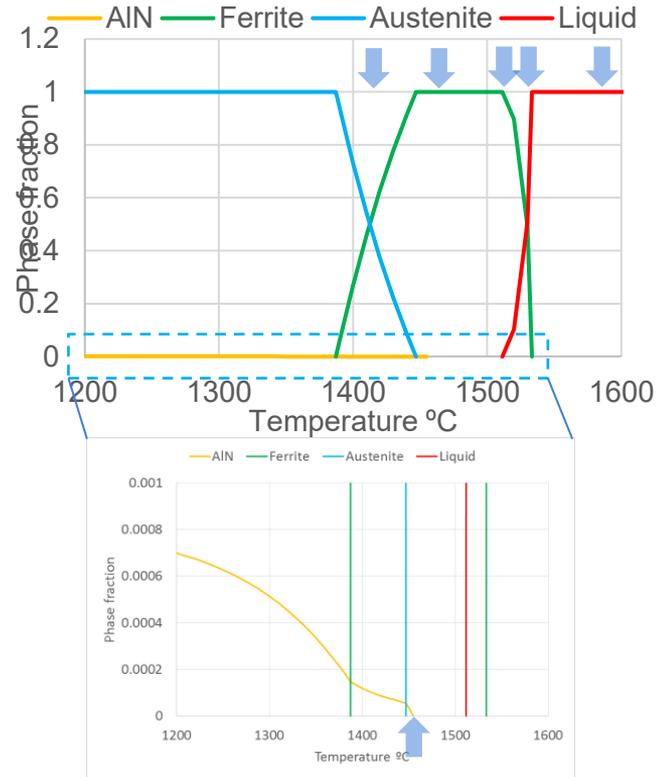
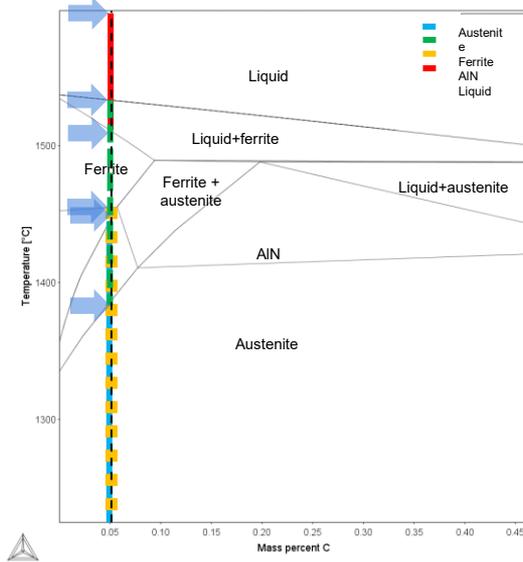
# El método CALPHAD

- *Calculation PHase Diagrams*: calculo de diagramas de fase
- Los diagramas de fase y las fracciones de fase se calculan con programas termodinámicos (ThermoCalc) utilizando base de datos termodinámicos.
- Los cálculos se realizan la mayoría de las veces en equilibrio. Scheil se considera el modo de segregación extremo... la realidad está entre el equilibrio y Scheil, pero más cerca del equilibrio.
- Cuando es necesario (para la composición de los precipitados), también se calcula la composición de cada fase.
- Un método sencillo... Lo suficientemente bueno... siempre y cuando, el equilibrio se considere una buena aproximación.
- Los modelos cinéticos deberían utilizarse más, pero por el momento también tienen algunas limitaciones (las teorías cinéticas de precipitación se basan principalmente en la deformación basada en la deformación)
- Solo recuerda... pasar del sistema Fe-C a uno multicomponente no es una tarea fácil para los aceristas...

# Modelización de la solidificación y la segregación @TSN R&D

- Cálculos termodinámicos
- Adimensional: fracciones de fase vs. temperatura (equilibrio o Scheil)
  - 1D a "pseudo 2D": incluye cinética y "algunas" dimensiones de dendritas (Dictra)
- Cálculos de microestructura:
  - 2D con método phase field (MICRESS)
  - 2D phase field incluyendo flujo de fluidos (open foam)

# Diagrama de fase y fracción de fase/temperatura

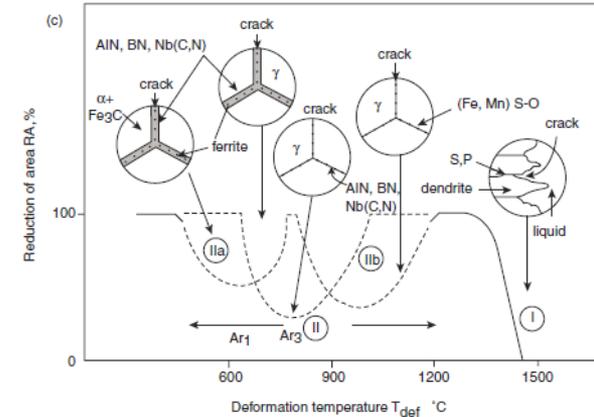
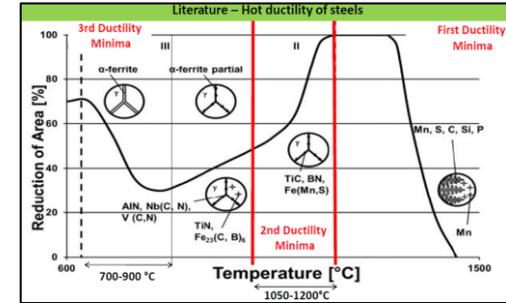


Ejemplo 1

# Grietas transversales en las esquinas

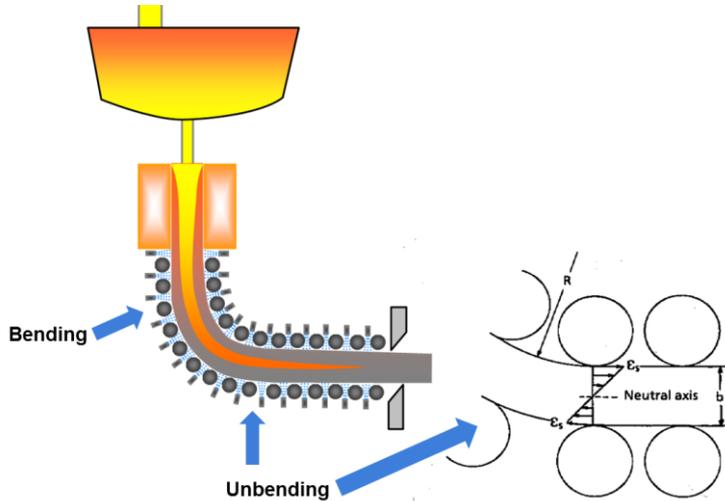
# Aceros microaleados y la reducción de la ductilidad

- HSLA son aceros micro-aleados con B, Al, Nb, Ti, V.
- Dichos elementos afectan la ductilidad del acero, debido a la formación de precipitados (en general carbo-nitrides)
- La reducción en la ductilidad (valles) es mínima entre 700C y 1200C dependiendo de la composición de elementos de aleación y la combinación de ellos.
- Para conocer con precisión el mínimo de ductilidad de un acero en particular, se necesitan tests de tracción en caliente en un amplio rango de temperatura.
- Es mucho más fácil y requiere menos tiempo realizar cálculos termodinámicos
- CALPHAD puede decirnos cuándo -temperatura- a la que comenzarán a formarse los precipitados, y la interacción entre los elementos, dándonos información valiosa sobre precipitaciones complejas.



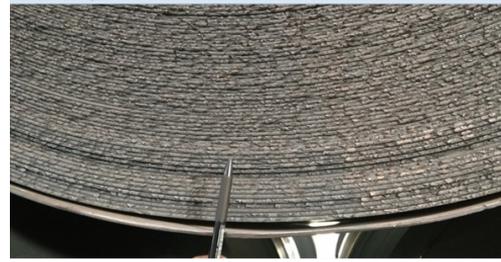
# Aceros microaleados y la reducción de la ductilidad

- La reducción de la ductilidad se relaciona con el agrietamiento transversal en la zona de inflexión de la colada continua.



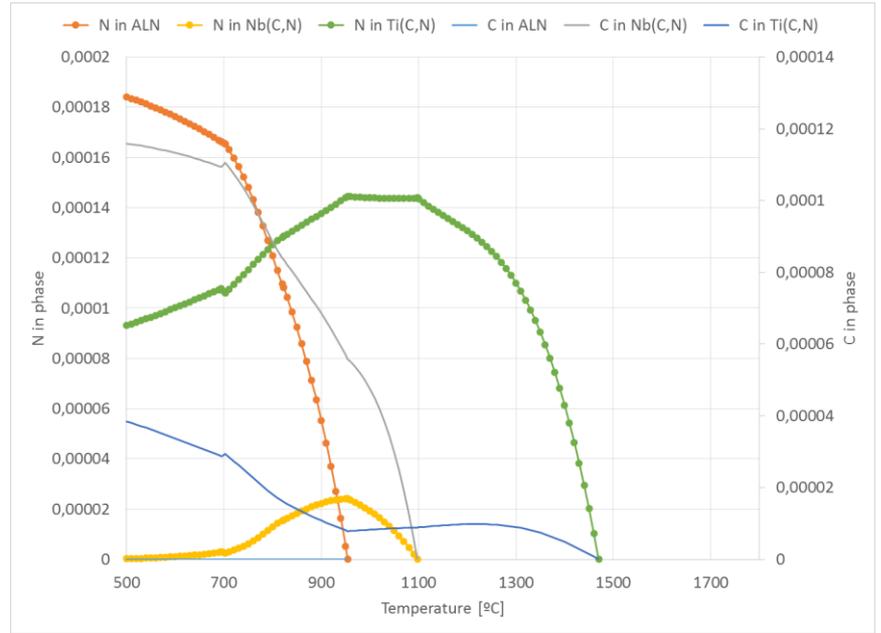
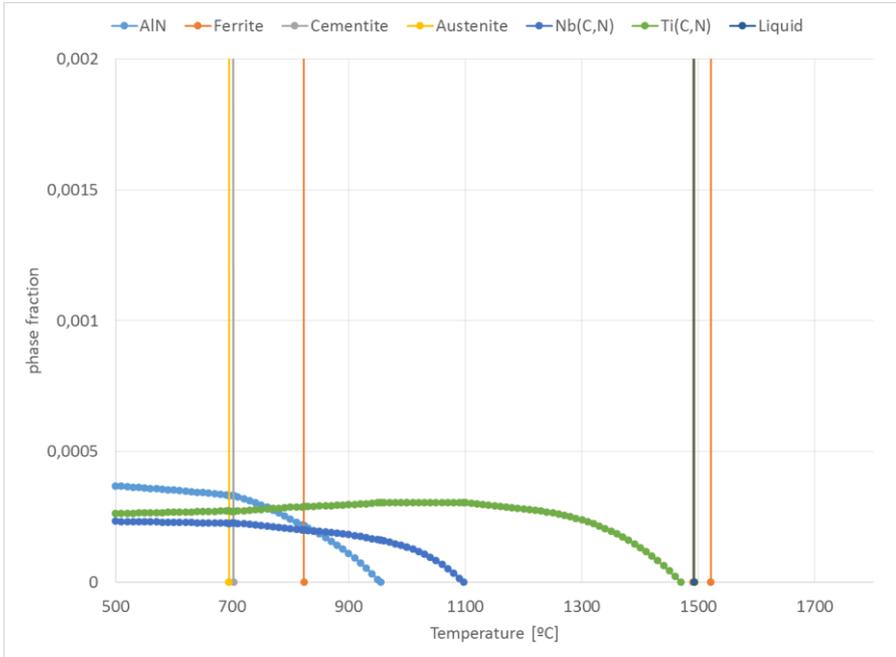
# Grietas de esquina

- El acero en estudio es un peritectico -HSLA que se produce en Tata Steel Kalinganagar
- La combinación de Nb y Ti es mejor que solo Nb para la resistencia del producto.
- La adición de Ti es para suprimir la actividad de N y, por lo tanto, promover la formación de NbC en el producto laminado, ya que es más beneficioso para las propiedades mecánicas del producto final.
- Dos elementos de microaleación: la precipitación se considera compleja.
- La precipitación de Ti y Nb se produce a temperaturas bastante diferentes y es coherente con la teoría de que puede haber dos valles de ductilidad.



	Steel A
<b>C</b>	0.14
<b>Mn</b>	1.05
<b>Si</b>	
<b>Al</b>	0.0405
<b>N</b>	90ppm max
<b>Ti</b>	0.0125
<b>Nb</b>	0.018

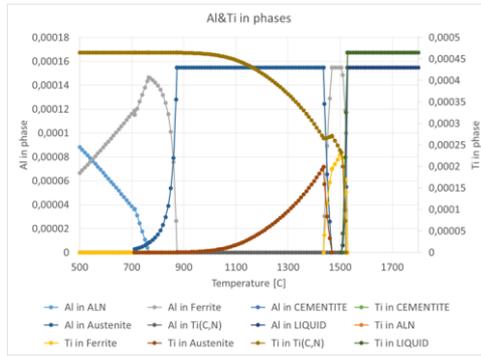
# Calculos termodinamicos



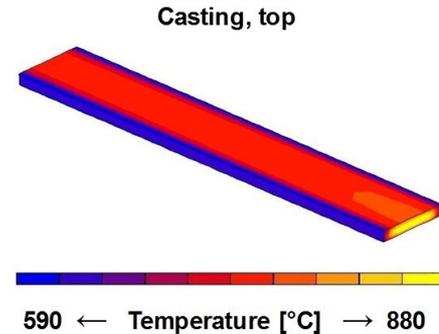
# Termodinamica y termo-mecanica

Con la información de CALPHAD y el modelado termomecánico para colado en particular es posible adaptar el proceso para reducir el agrietamiento transversal.

¿Cómo? Relacionar la temperatura a la que van a aparecer los precipitados y la temperatura de la superficie del planchón (especialmente en las esquinas) durante la colada, en la zona de flexión o enderezamiento.

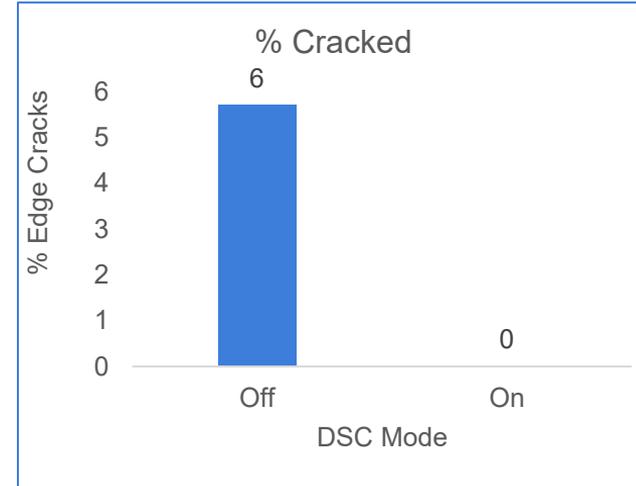
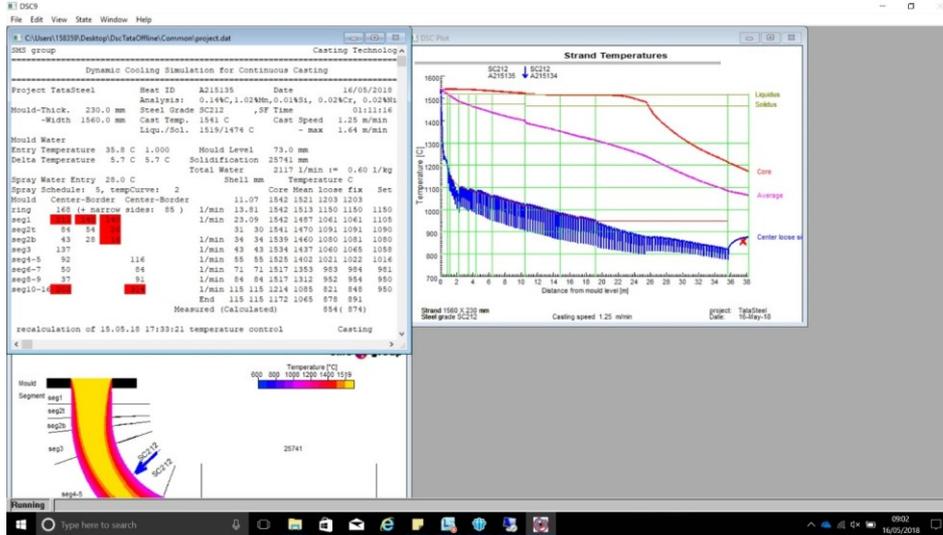


+



*Temperature contour plot at Caster exit*

# Pruebas en la planta

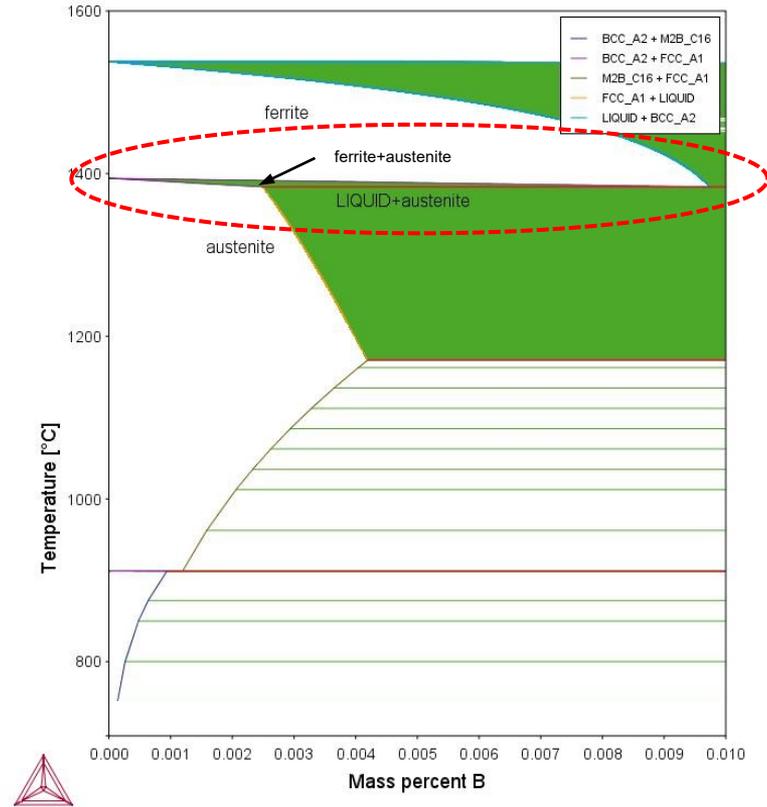


Ejemplo 2

# **Aceros aleados con Boro**

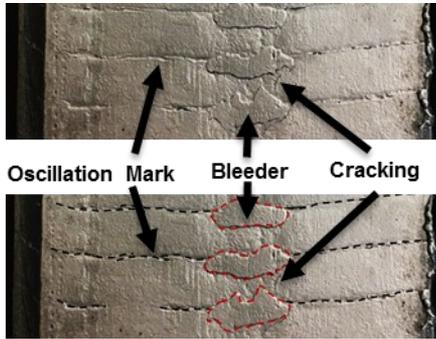
# Aceros Fe – B

- Se sabe que los aceros que contienen B tienen la transformación "metatéctica" durante la solidificación, donde al enfriarse aparece una "nueva" fase (¡líquido!) en los límites de grano que conduce a grietas y pinchaduras durante el proceso de colada continua.

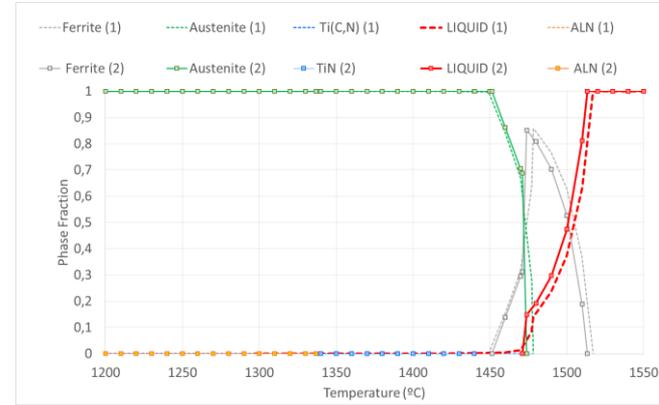


# Aceros Fe – B

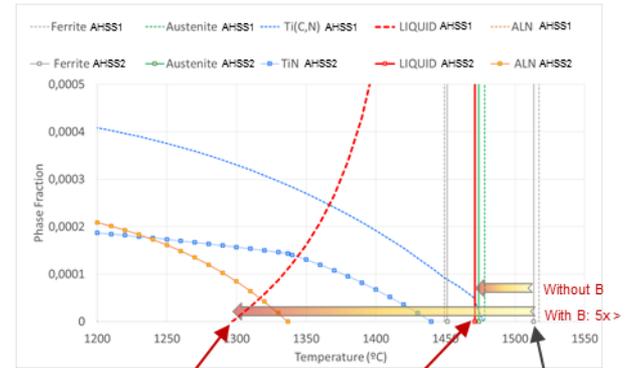
- El contenido de boro en el acero también juega un papel importante en la temperatura del sólido, puede disminuirla hasta 1297 ° C, por lo que la fase líquida está presente por mucho más tiempo en comparación con el mismo acero sin boro.



Example of a bleeder in steels



Thermo-Calc calculations of phase fraction



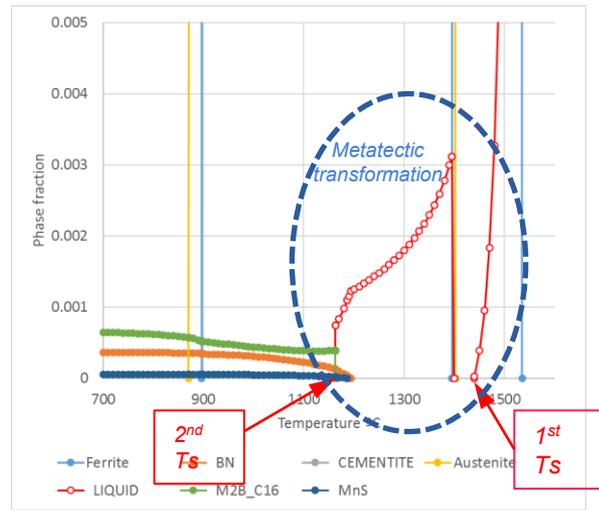
$T_s$  AHSS1=1297°C  
End of solidification  
(steel with B)

$T_s$  AHSS2=1474°C  
End of solidification  
(steel without B)

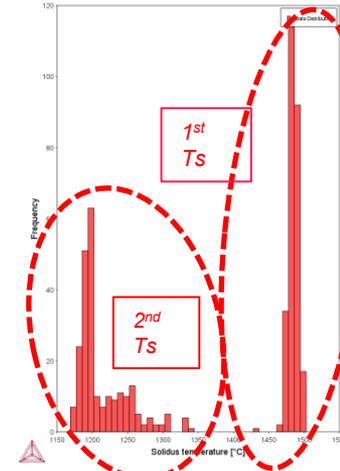
$T_L$  AHSS1 & AHSS2≈1520°C  
Onset of solidification  
(steel with & without B)

# Transformación metatéctica – Aceros B-

B-steel



Metatectic transformation for the B grade



Statistical calculation for the two Ts (B grade)

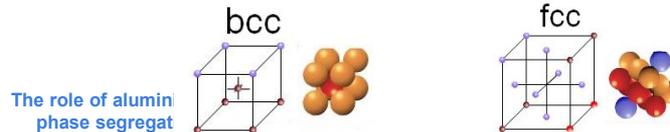
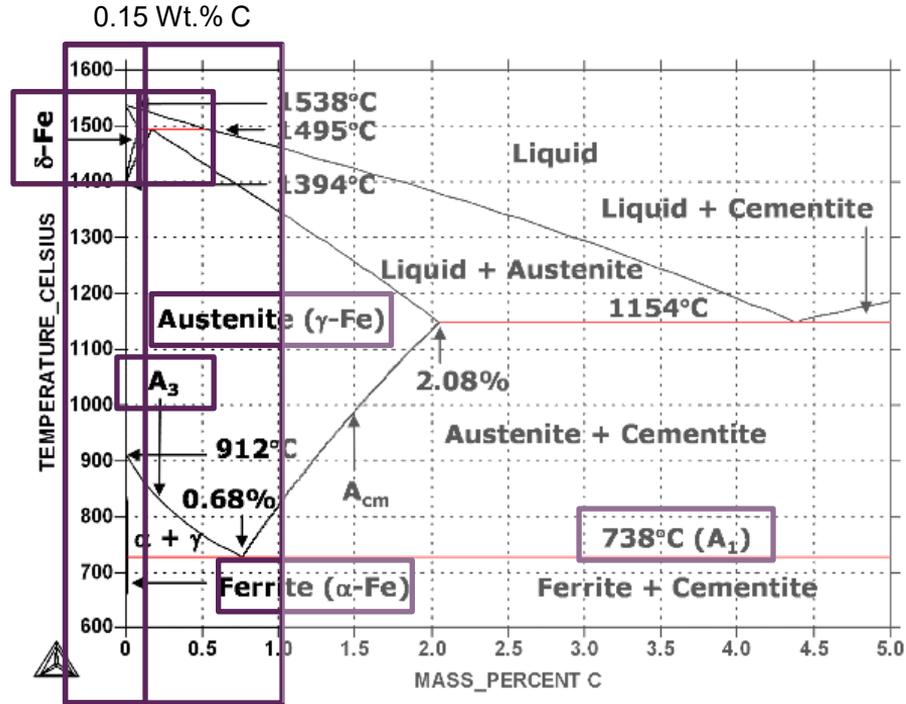
Ejemplo 3

# “2D” termodinámica

# Intro a este ejemplo

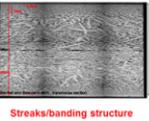
Element	Wt. %
C	0.15
Mn	2.05
Al	0.6
Si	0.4
Cr	0.4

Además de algunos otros elementos en cantidades (muy) pequeñas...

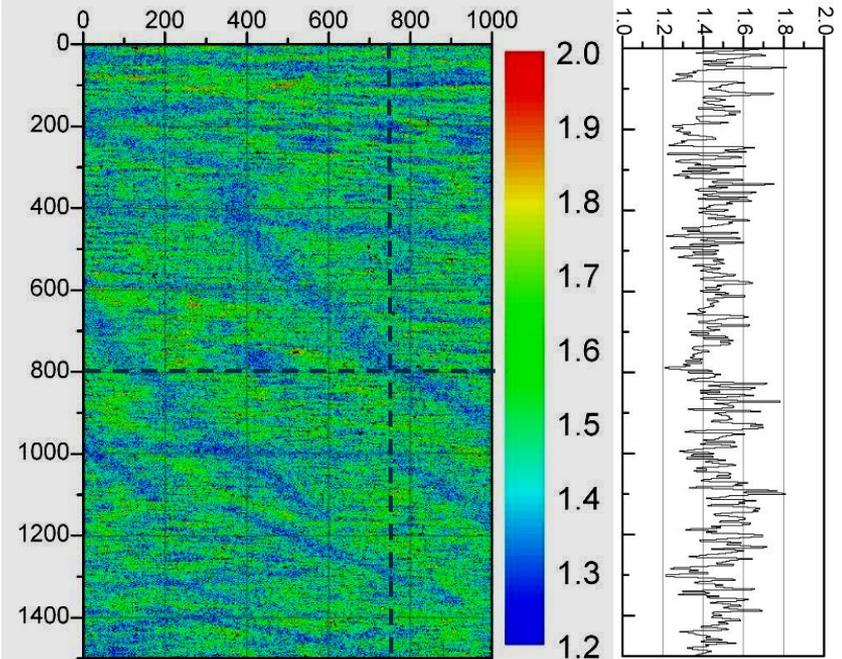
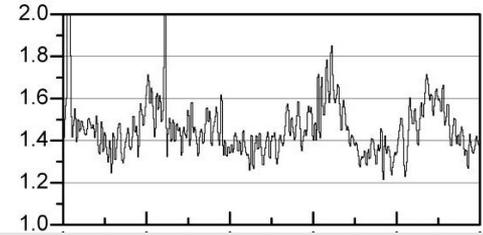
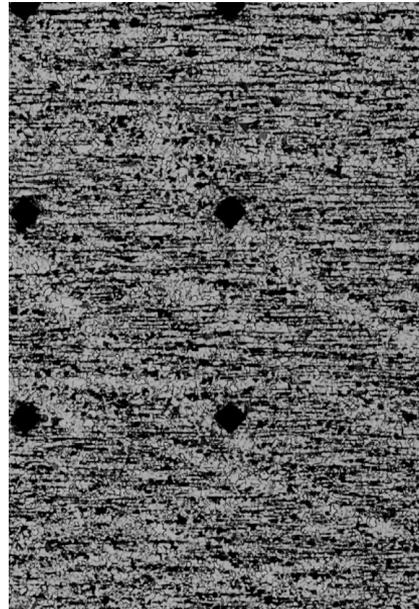


# Bandas de ferrite se relacionan con el empobrecimiento de Mn en las dendritas

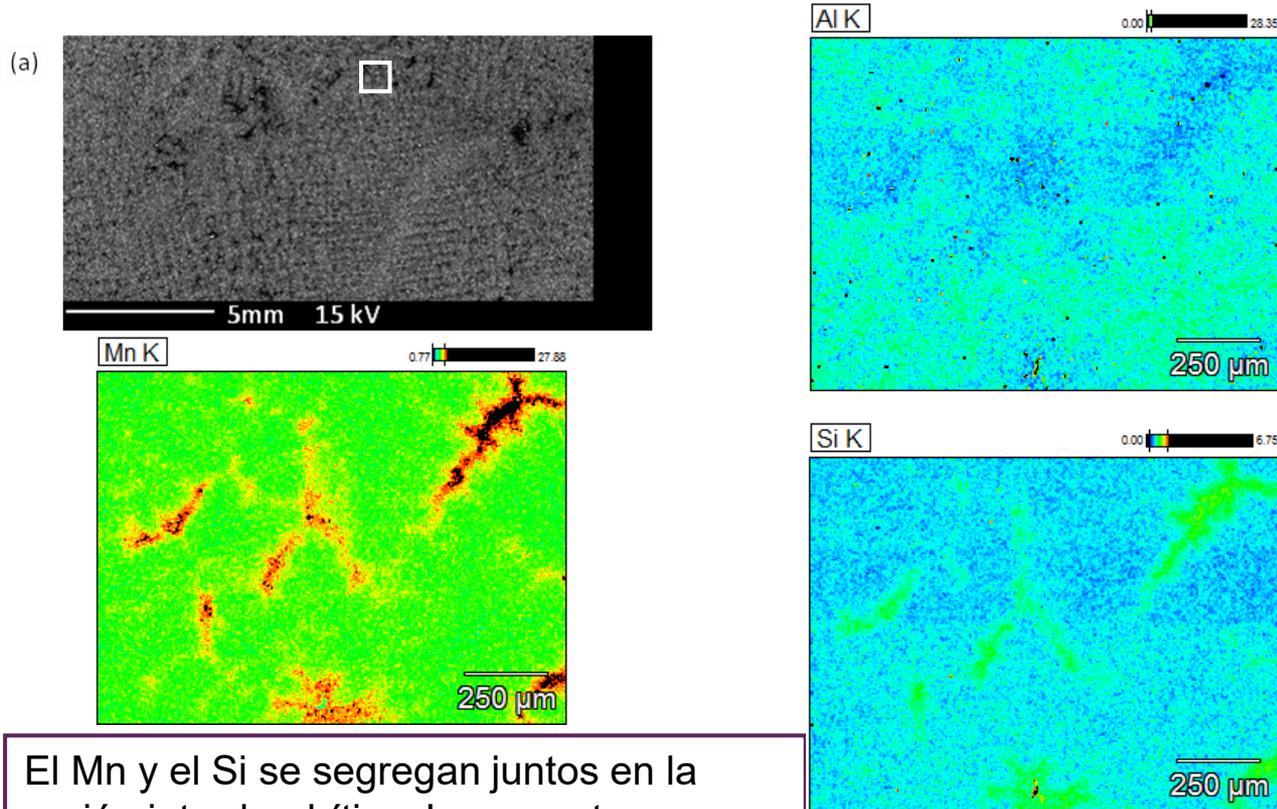
Ferrite  
Pearlite



(hardness  
indents)

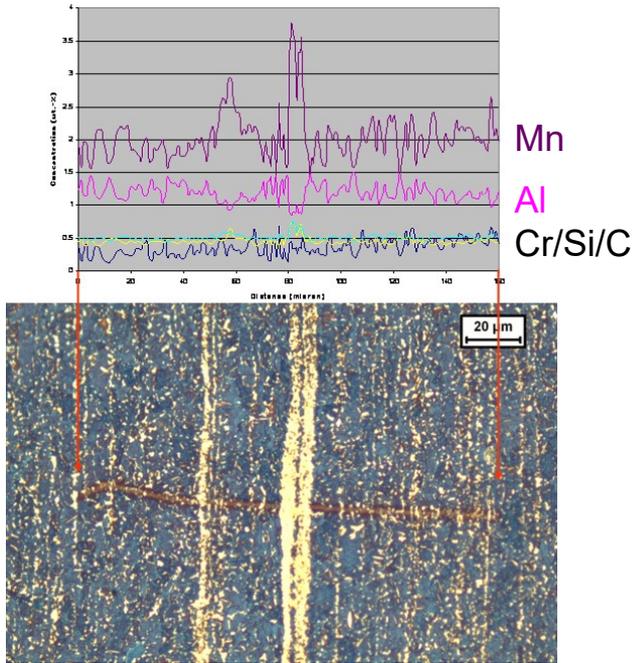


# Distribución de los elementos en la estructura



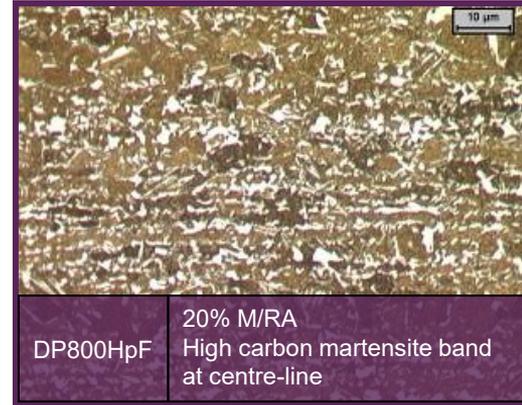
El Mn y el Si se segregan juntos en la región interdendrítica. Lo opuesto ocurre con el Al.

# Segregacion central

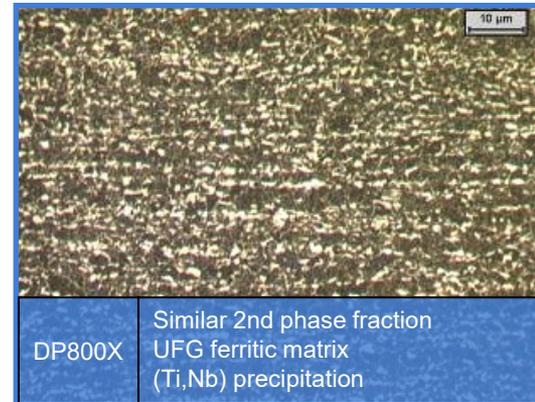


Segregation coefficient	Al	Cr	Mn	Si
	0.7	1.2	1.5	1.4

Measured segregation coefficients in DP800HpF



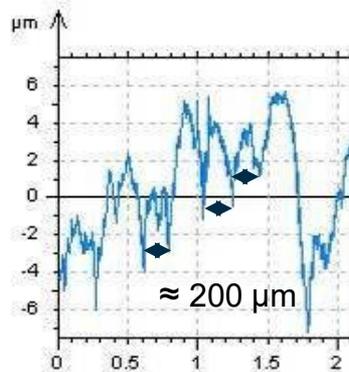
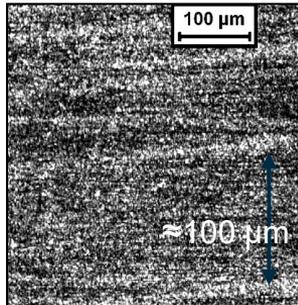
DP800HpF  
20% M/RA  
High carbon martensite band at centre-line



DP800X  
Similar 2nd phase fraction  
UFG ferritic matrix  
(Ti,Nb) precipitation

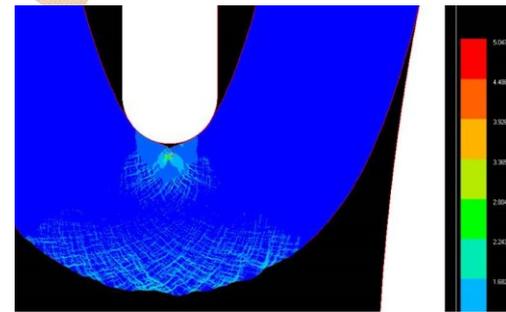
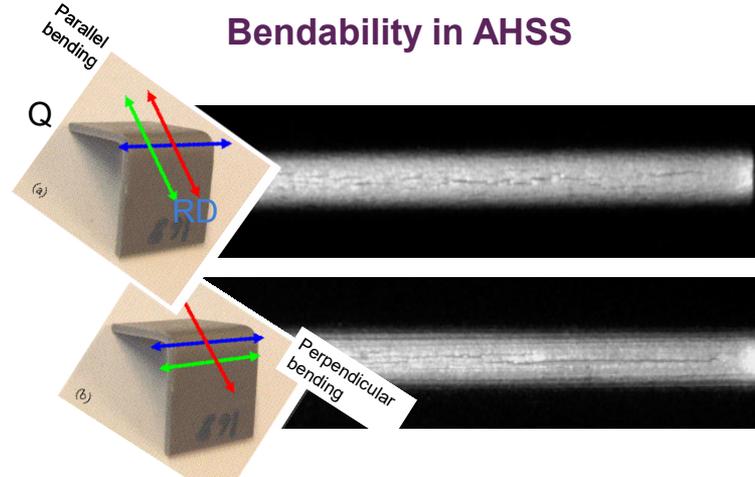
# Efecto de las bandas de ferrita en las propiedades mecánicas

## Roughness in DP1000



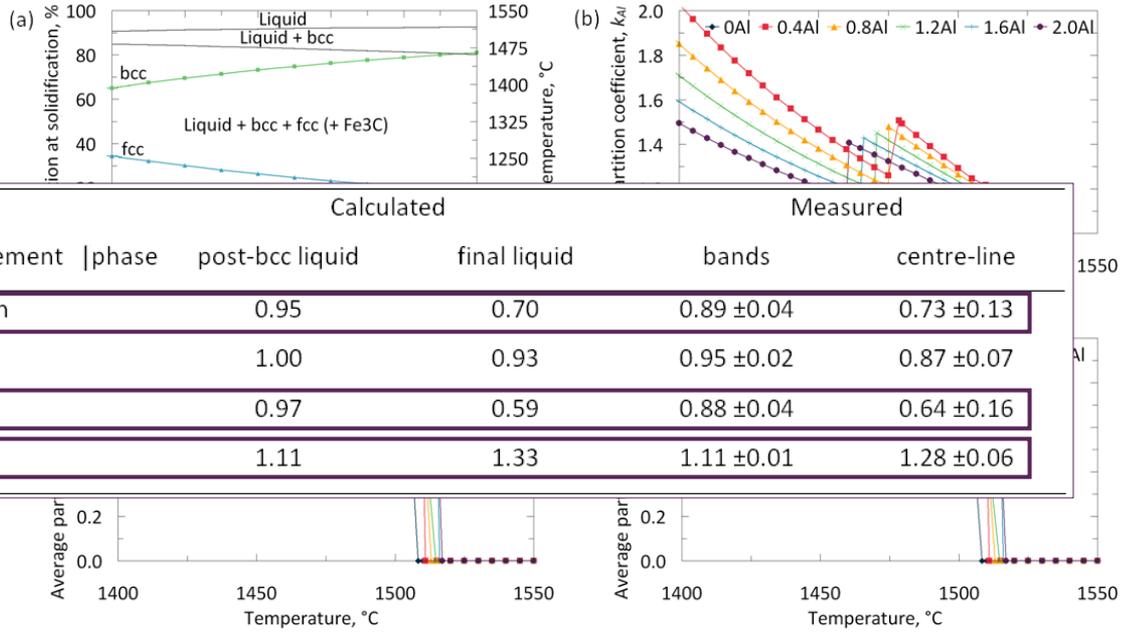
L

## Bendability in AHSS



Bending performance 10-20% worse in longitudinal direction due to structure differences resulting from segregation

# Efecto del Al durante la solidificación

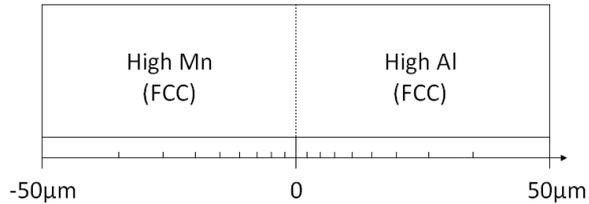


$$k = \frac{C_S}{C_L}$$

Where:  
 $C_L / C_S$  solute concentration in liquid/ solid  
 $k$  equilibrium partition coefficient

Effect of aluminium on (a) phase fractions and transformation temperatures, and on the average partition coefficient of (b) Al, (c) Mn and (d) Si in Fe-0.15C-2Mn-0.4Cr-0.4Si-(x)Al steel, where  $x = 0 - 2$  wt. %.

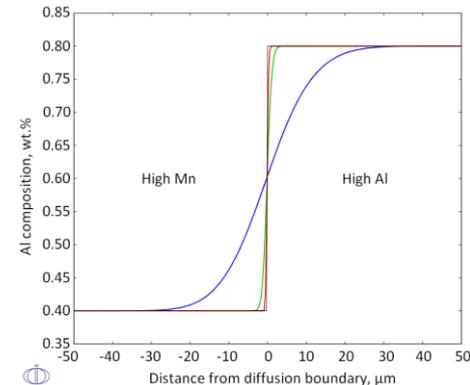
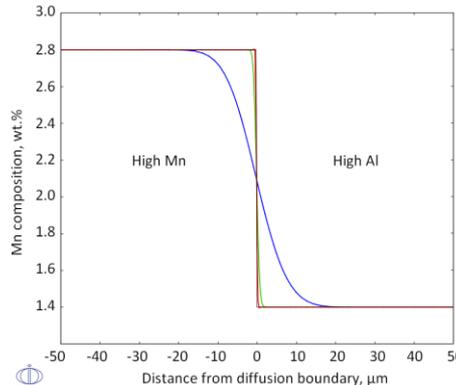
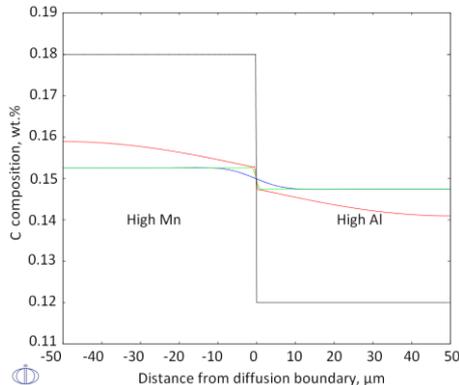
# Homogeneización durante el recalentamiento; Realidad vs. Ficción



wt. %	High Mn	High Al
Fe	96.62	97.68
C	0.18	0.12
Mn	2.8	1.4
Al	0.4	0.8

Cálculos con DICTRA:

- la difusión de los elementos de estado sólido (Al/Mn) durante el recalentamiento es demasiado lenta para dar lugar a una homogeneización química
- Los perfiles de segregación presentes después de la solidificación permanecen a lo largo de los procesos posteriores

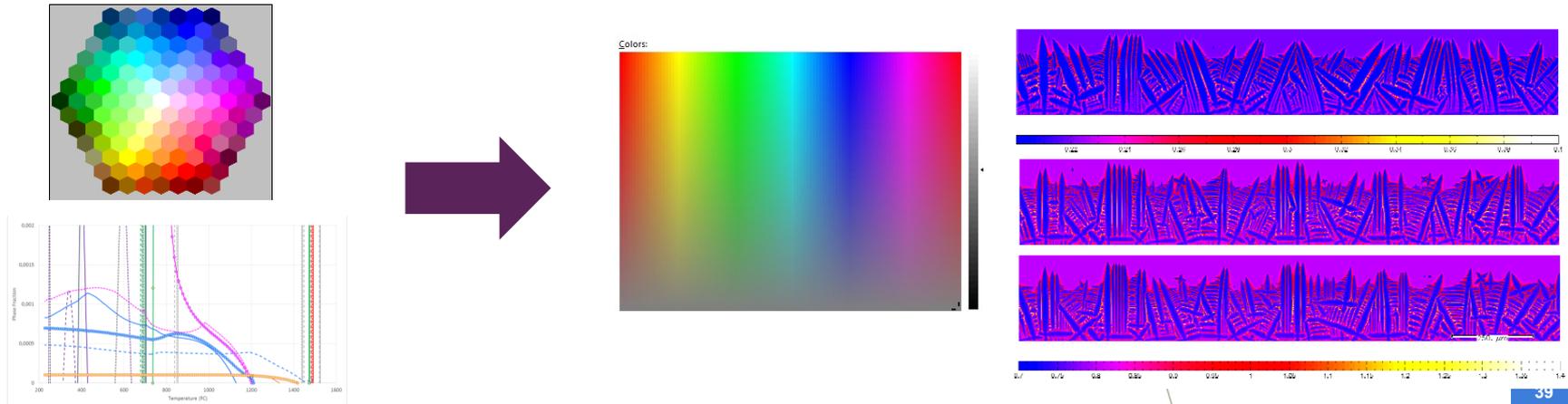


Distributions of C, Mn, Al along the diffusion path/ boundary for time steps of 100, 1000 and 100,000 s (28 h)

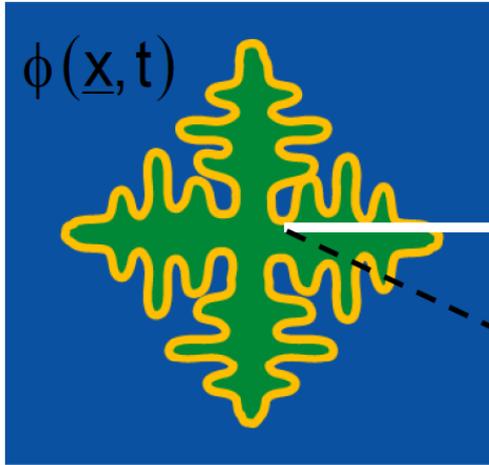
# Simulaciones con Phase field

# Siguiente paso?

- Los aceros siguen siendo el material preferido y requieren un gran esfuerzo de investigación.
- Para los nuevos aceros complejos, los sistemas pseudo-binarios ya no son útiles. Se necesita un método CALPHAD.
- Pero hay algo más que equilibrio... La segregación es muy importante y necesita otro enfoque (pase field/cálculos con cinética).



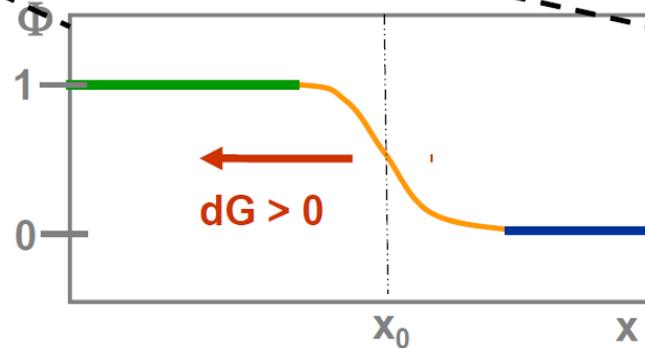
# El método phase field



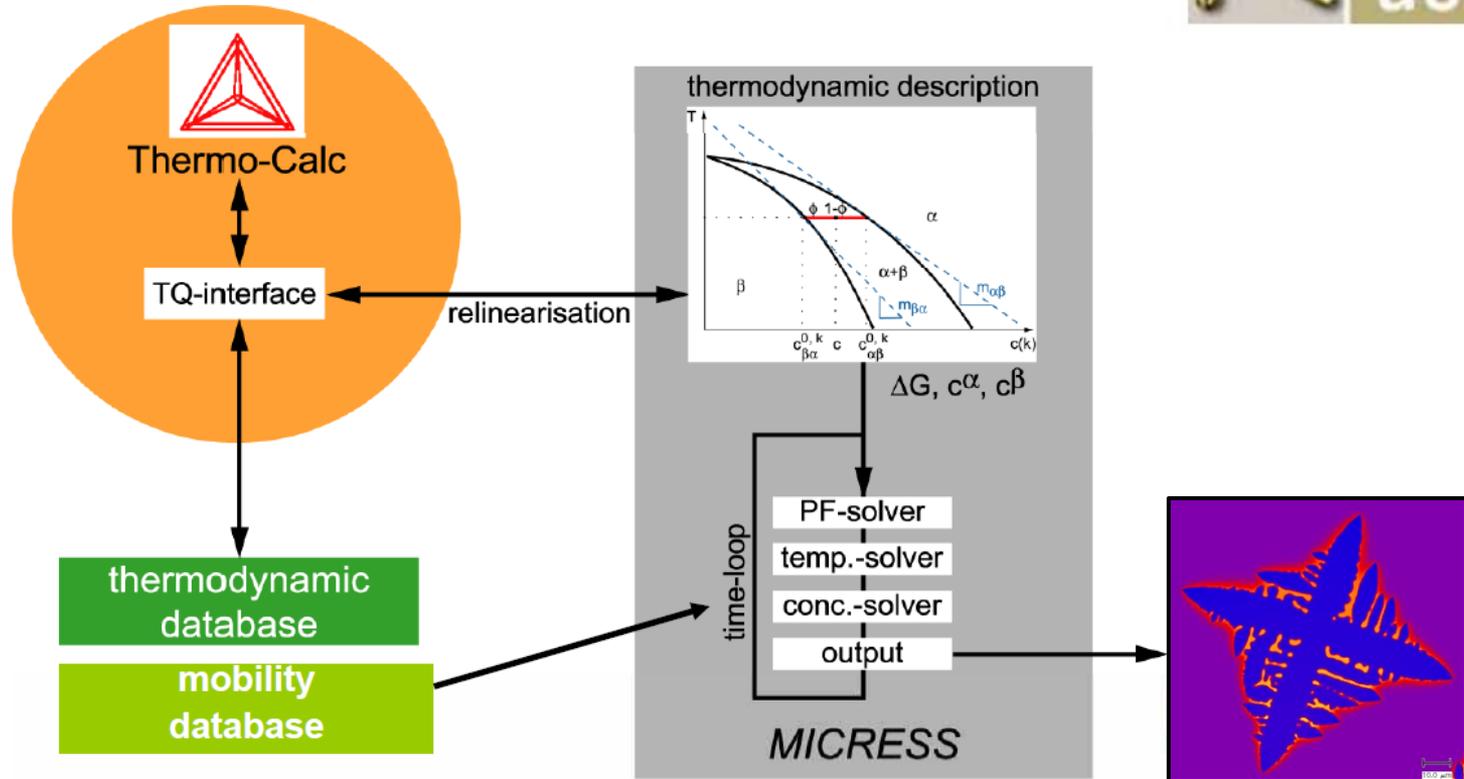
A PDE describes the evolution of the phase-field  $\Phi(\underline{x}, t)$ . The stationary solution describes the profile of the – diffuse- interface

Depending on local conditions at the interface there is a driving force  $dG$  for

growth ( $dG < 0$ )  
or dissolution ( $dG > 0$ )

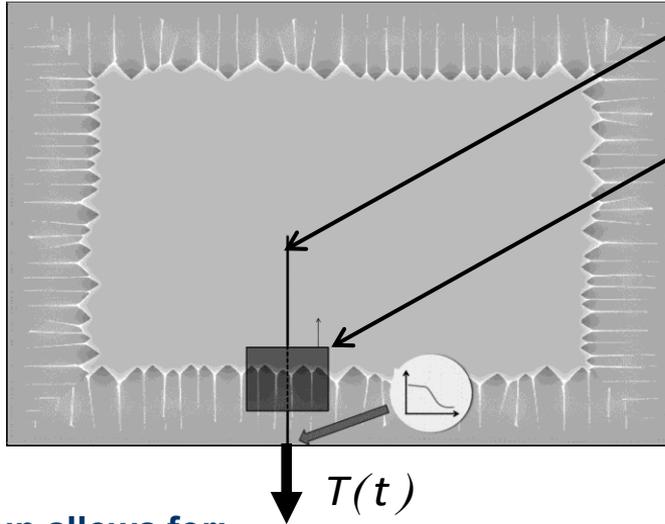


# Acoplamiento ThermoCalc y MICRESS



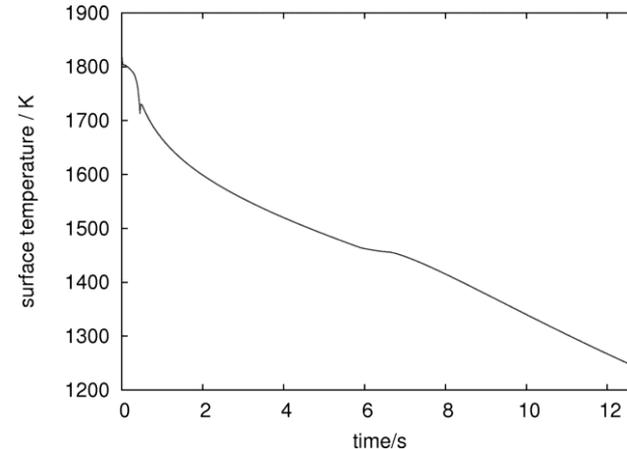
# Configuración de simulación para colada continua: condición límite de temperatura

**Moving slice of slab:**



1D temperature field (fixed)  
(3000 grid cells,  $\Delta x = 15 \mu\text{m}$ )

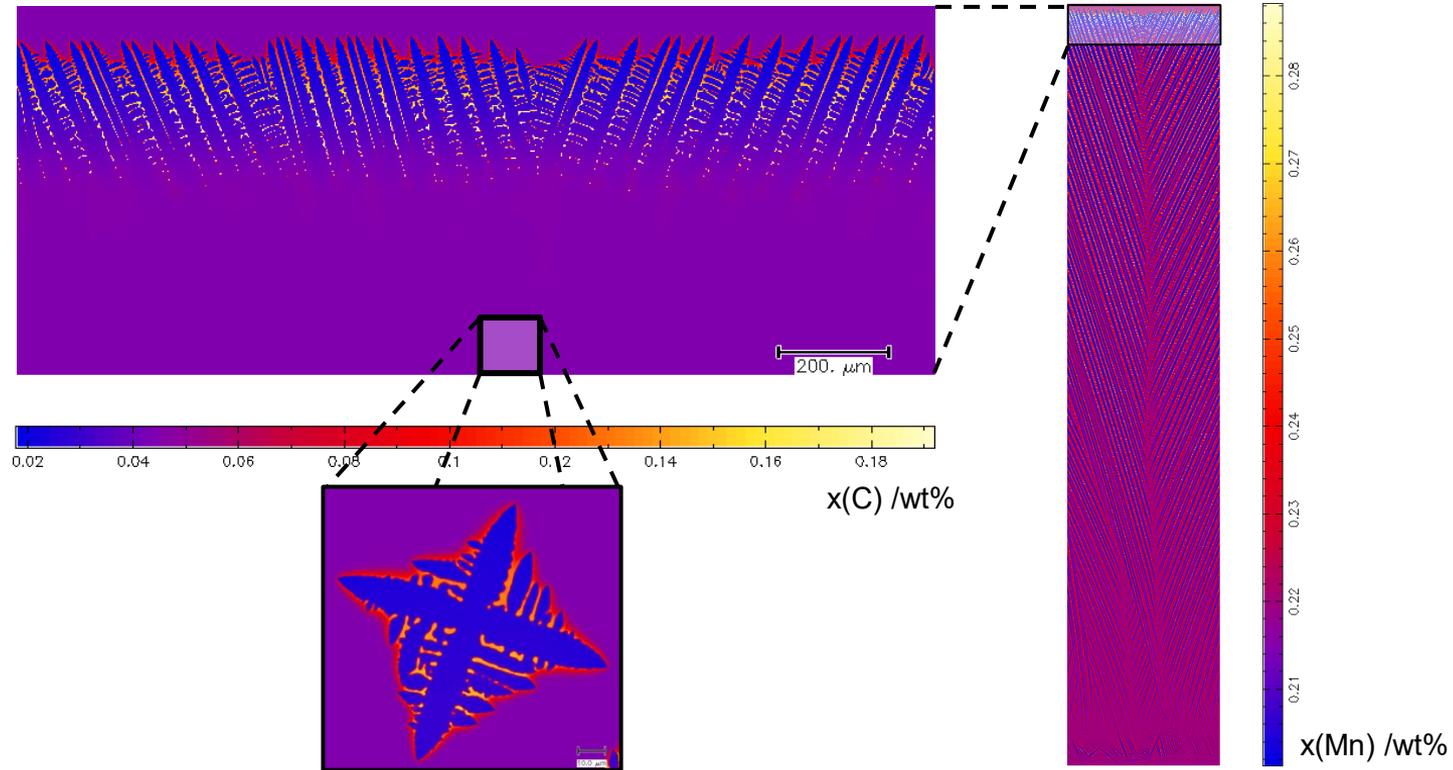
microstructure domain (moving)  
(5000 x 2000 grid cells,  $\Delta x = 0.333 \mu\text{m}$ )



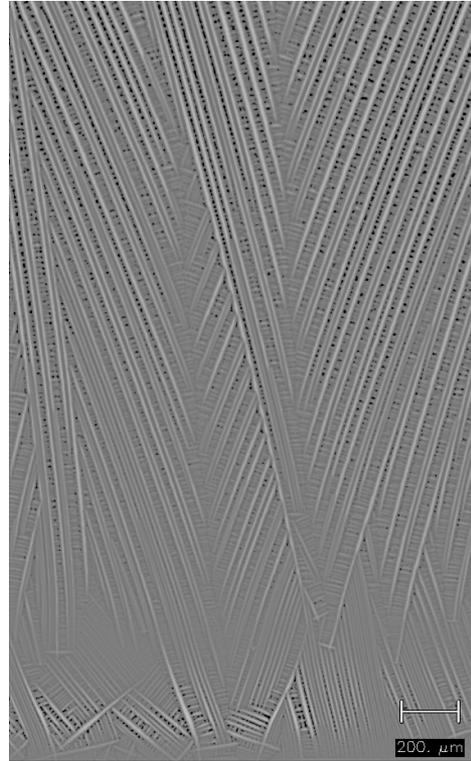
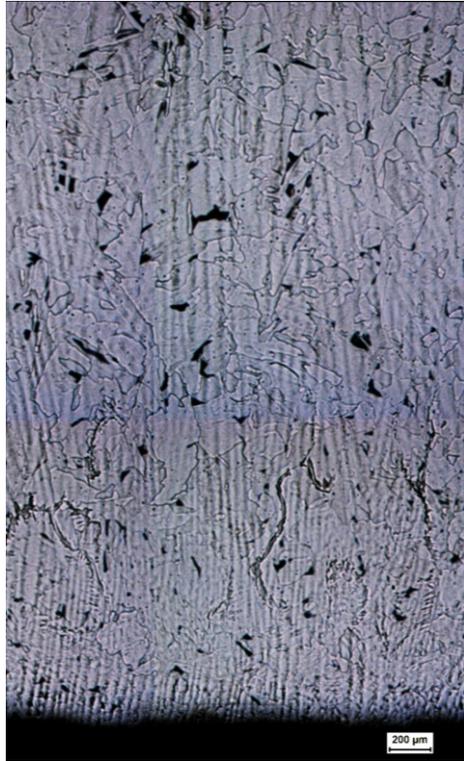
**Setup allows for:**

- transient and nonlinear temperature profiles
- consistency between microstructure and temperature field using the “Homoenthalpic” Approach

# Configuración de simulación para colada continua: representación de resultados para un acero de bajo carbono



# Comparación, microscopía óptica y simulación



# Scenario for Effects of Precipitations

- Differences between alloys ② and ③:

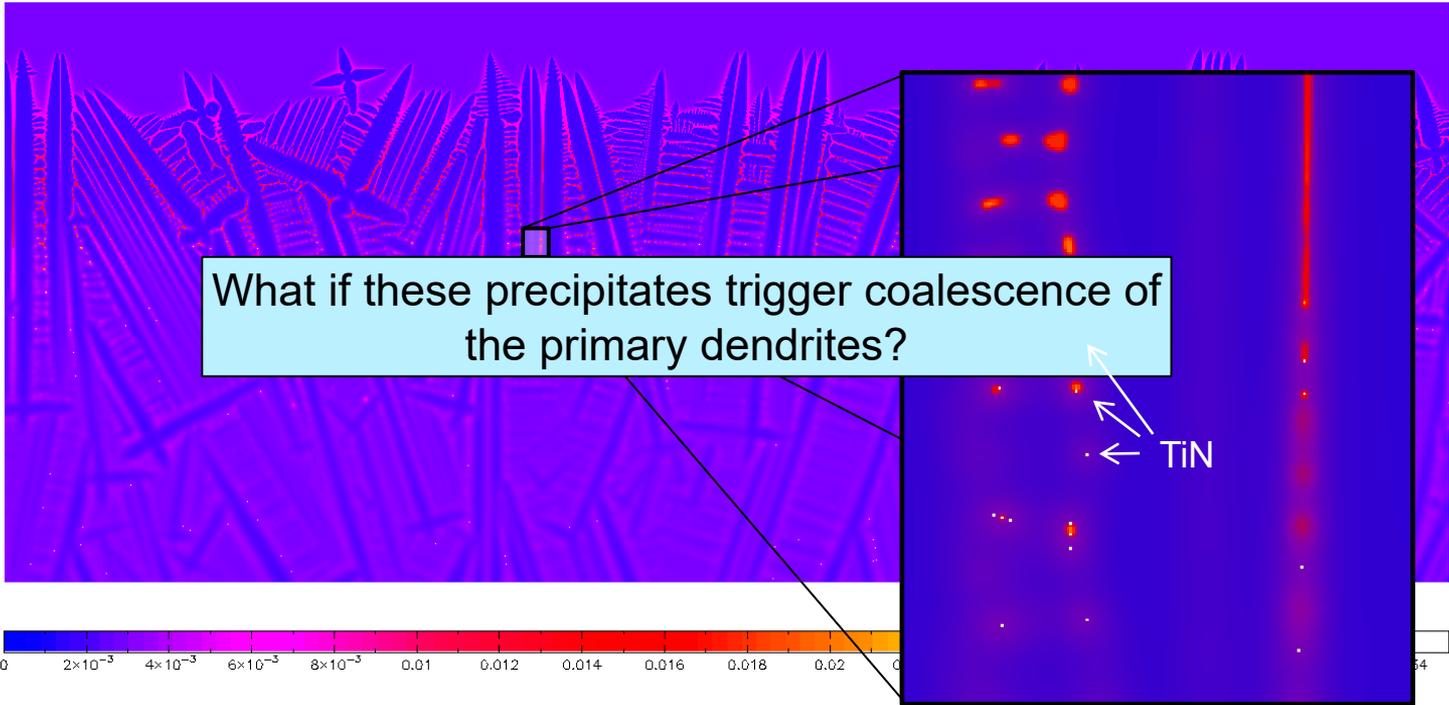
**Table 1:** Typical chemical composition of three steel grades

Steel grade	C (wt %)	Mn (wt %)	V (wt %)	Nb (wt %)	N (ppm)	
					aim	max
① LCAK	0.045	0.22	-	-	-	50
② LR-HSLA	0.045	0.8	0.04	0.013	80	100
③ HSLA	0.045	0.8	0.13	0.013	130	150

Formation of  
VN?

- VN precipitation typically takes place at low temperatures (<800°C) → no effect on hot cracking!
- **Hypothesis:**
  - small amounts of Ti are found in all three alloys (typically ~0.003 wt%)
  - precipitation of TiN could occur already before end of solidification

# Simulación del HSLA steel + 0.003 wt% Ti con Phase-Field



# Conclusiones

## Algunas conclusiones...

- La solidificación y la segregación son clave para comprender la solidificación y el efecto posterior en las propiedades del producto final.
- ThermoCalc es nuestra elección: hay muchos métodos disponibles para calcular y simular la termodinámica y la microestructura durante la solidificación. No todos los métodos están dedicados a los aceros y no todos son necesarios, depende del problema a abordar.
- Trasladar de la investigación y el desarrollo al proceso industrial: la clave es entender los resultados y encontrar una aplicación para mejorar el proceso o el producto.

# Referencias

1. B. Santillana PhD Thesis “Thermo-mechanical properties and cracking during solidification of thin slab cast steel”, 2013 Delft University of Technology
2. “Phase Field Modeling of Microstructure Formation during the Solidification of Continuously Cast Low Carbon and HSLA Steels”, B.Santillana, B. Böttger, M. Apel, D. Eskin, Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes MCWASP XIII, Shaldming, Austria, June 2012.
3. “Multi-Phase-Field Modeling of Solidification in Technical Steel Grades”, B. Böttger, G. J. Schmitz, B. Santillana, Transactions of the Indian Institute of Metals: Volume 65, Issue 6 (2012), Page 613-615
4. The role of aluminium in chemical and phase segregation in a TRIP-assisted dual phase steel, BL Ennis, E Jimenez-Melero, R Mostert, B Santillana, PD Lee, Acta Materialia, Vol. 115, 2016, pp. 132-142
5. Temperature control in secondary cooling to reduce cracking susceptibility in hsla steels at the tata steel continuous caster in kalinganagar, india, B. Santillana, K. Malla, R. Ranjan, P. Palai, M. K. Singh, S. Pathak, 10th European Continuous Casting Conference, Bari, Italy, October 2021.
6. Thermo-Calc modelling of as-cast features and its influence on final mechanical properties, B. Santillana, ThermoCalc webinar, February 2023
7. Phase Field simulations of segregation and precipitates formation during steel solidification, B. Santillana, V. Paruchuri, U,. Prah, XVI MCWASP conference, June 2023, Banff, Canada
8. Castability assessment of commercial steel grades with thermodynamic databases, B. Santillana, P. Sturm, H. Wouters, 1st Annual Thermodynamics of Materials Symposium AToMS, UK, 2018

**Do you have any questions?**

**Tata Steel R&D**

Dr. Ir. Begoña Santillana

Principal Scientist

Steelmaking & Casting Group

Ironmaking, Steelmaking & Casting Dept.

[www.tatasteeleurope.com](http://www.tatasteeleurope.com)