

Os tratamentos termoquímicos dos aços são baseados na adição de um agente modificador à superfície do aço, a partir do contato do metal com um meio ativo, tipicamente gasoso. Dentre os agentes mais conhecidos estão o *nitrogênio* para a nitretação, o *boro* para a boretação, e o *carbono* para a cementação. Alguns desses agentes também podem ser combinados entre si, como é, por exemplo, o caso do nitrogênio e do carbono para a nitrocarburação. O objetivo geral do presente trabalho é analisar, por meio da ferramenta termodinâmica computacional, a criação, o controle do agente promotor da modificação superficial dos aços no estado sólido (atividade, potencial químico), bem como a previsão das *fases* presentes no metal no estado de equilíbrio. O foco do trabalho será acompanhar a modificação da composição do aço – ou seja, das fases que o constituem – como um resultado da interação termoquímica entre a atmosfera e o metal sólido. As diferentes atmosferas *interagem termoquimicamente* com o aço que está sendo tratado, modificando-o e modificando-se simultaneamente. A modificação da composição química do aço e de suas fases pelo processo termoquímico influencia suas propriedades – fato de extrema relevância, que evidencia a dependência que existe entre o processamento e as propriedades dos aços, tais como: *dureza*, *tenacidade*, etc. Já a modificação da atmosfera é analisada e corrigida para mantê-la sempre ativa. Três tipos de tratamentos termoquímicos – e seus fundamentos – serão enfocados neste trabalho: a cementação, a nitretação e a nitrocarburação. Para o presente estudo, fez-se uso do aplicativo de termodinâmica química FactSage v. 6.2 e dos seguintes bancos de dados: (a) FSstel para as fases sólidas e, (b) FACT53 contendo gases e fases intermetálicas. Os resultados mostram que se pode compreender os processos industriais de tratamentos termoquímicos a partir de uma forte base científica. Por exemplo, a cementação pode ser compreendida como uma função da temperatura e da atividade do carbono enquanto que a nitretação pode ser entendida como uma função da temperatura e da pressão parcial de nitrogênio. Já na nitrocarburação há que se levar em conta esses três fatores conjuntamente.