

ESTUDO POR SIMULAÇÃO DA EVOLUÇÃO DA  
MICROESTRUTURA DE UM MATERIAL DURANTE  
A TRANSFORMAÇÃO MARTENSÍTICA

José Roberto Costa Guimarães  
Fundação de Tecnologia Industrial  
Av. Venezuela 82  
20081 - Rio de Janeiro - RJ

e

Ulysses R.A. Lino  
Instituto Militar de Engenharia  
Pça Gen Tiburcio s/nº  
22290 - Rio de Janeiro - RJ

RESUMO

Desenvolveu-se uma sistemática para simular a microestrutura de um material durante a transformação martensítica. Os resulutados obtidos na simulação podem ser considerados como descrevendo qualitativamente o comportamento experimental verificado com uma liga Fe-Ni-C.

A method was developed to simulate the microstructure of a steel during martensitic transformation. The data produced by simulation are in qualitative agreement with the experimental data collected with Fe-31.9Ni-0.02%C.

## Introdução

Um dos aspectos mais críticos à interpretação da cinética da reação martensítica é o relacionado à distribuição geométrica das placas de martensita nos grãos da austenita. Este problema foi considerado teoricamente pela primeira vez por Fisher, Hollomon e Turnbull (1) em 1949 e repetidamente analisado experimental e teoricamente por vários autores (2-5). Na maioria destes trabalhos é sugerido que o desvio (usualmente verificado) dos resultados experimentais das predições teóricas, é devido ao fenômeno de autocatálise. Isto conduz a um impasse pois, desconhecendo-se os detalhes do processo autocatalítico, torna-se impossível verificar a adequabilidade das hipóteses geométricas usadas na formulação dos modelos teóricos, i.e., até que ponto as discrepâncias teorias-experiências são exclusivamente devidas à autocatálise.

Com a finalidade de contornar este impasse, decidiu-se simular o desenvolvimento de uma reação martensítica em um material bi-dimensional policristalino, admitindo-se à semelhança de modelos teóricos (1,2 e 4) que a transformação ocorre por um processo de nucleação uniforme e isento de autocatálise. Neste trabalho são descritos os resultados preliminares do estudo.

## Métodos Experimentais

A microestrutura da matriz (austenita) foi representada por uma rede hexagonal. A fim de avaliar a influência do tamanho de grão da austenita foram usadas duas redes uma com tamanho de grão (médio)  $\bar{d}_2 = 5,3\text{cm}$  e outra com  $3,3\text{cm}$ . Por conveniência experimental, escolheu-se uma morfologia acicular para as martensitas, representadas nas microestruturas simuladas por segmentos de retas com comprimentos determinados por interseções com outras agulhas ou com os contornos de grão.

O comprimento,  $L_i$ , de cada agulha foi determinado diretamente sobre a micrografia simulada. Convém notar que o comprimento total das agulhas,  $L_t = \sum L_i$ , é proporcional à fração do material transformado.

O comprimento médio livre,  $\bar{\lambda}_2$ , na matriz foi obtido da expressão clássica,

$$\bar{\lambda}_2 = \bar{v} A / 2 (L_g + \sum L_i) \quad (1)$$

onde  $A$  é área da micrografia,  $L_g$  o perímetro de contornos de grão e  $L_i$  já foi definido acima.

Outros parâmetros determinados sobre as micrografias simuladas foram a fração da área do material,  $A_A^b$ , ocupada por grãos parcialmente transformados e o perímetro,  $L_b$ , dos contornos entre os grãos parcialmente transformados e o resto do material.

## Resultados Experimentais

### Estágio de Espalhamento

Uma reação martensítica não ocorre simultaneamente em todos os grãos da austenita. Na realidade a reação é extremamente heterogênea, iniciando-se em alguns grãos e, espalhando-se para os demais com o progresso da transformação. Este estágio da reação é denominado de "espalhamento", Fig.1.

Com o desenvolvimento da reação, também se verifica o "preenchimento" dos bolsões de austenita não transformada. Este processo predomina no fim e após o término do "espalhamento", i.e., quando todos os grãos austeníticos contem alguma transformação.

A duração do processo de espalhamento (em termos de fração volumétrica de martensita) pode ser sensivelmente estendida, reduzindo-se o tamanho do grão austenítico (5). Os dados da Fig.2 in

dicam que a transformação simulada também exibe este mesmo tipo de comportamento. Os valores de  $A_A^b$  (fração da área do material constituída de grãos parcialmente transformados), para um mesmo valor de  $\Sigma L_i$  (proporcional à fração volumétrica de martensita transformada) é maior no material de granulação mais grosseira. Isto se deve ao fato da formação de uma agulha em um grão não-transformado produzir um incremento em  $A_A^b$  proporcional ao tamanho do grão austenítico. Logo  $A_A^b$  deve crescer mais rapidamente no material de granulação mais grosseira.

A evolução do espalhamento da reação martensítica já foi estudada experimentalmente em Fe-31.9%Ni-0.02%C (5), tendo sido observada uma relação bem definida entre a área de interfaces por unidade de volume de material,  $S_V^b$ , entre os grãos parcialmente transformados e o resto do material, e, a fração volumétrica,  $G_g$ , do material constituída de grãos parcialmente transformados.

No caso da simulação, os parâmetros a considerar (em analogia ao caso do Fe-Ni-C) são o perímetro,  $L_b$ , de contornos de grãos que limitam as regiões parcialmente transformadas e a fração  $A_A^b$ , da área do material correspondente aos grãos parcialmente transformados. Para possibilitar uma comparação direta de ambos os conjuntos de dados, decidiu-se normalizar os valores dos diferentes parâmetros, tomando por base as propriedades das austenitas não transformadas. Os valores de  $S_V^b$  serão dados em função de  $S_V$ , a área de interfaces intergranulares na austenita, e os de  $L_b$  serão apresentados em função de  $L_g$  o perímetro total de contornos de grão na microestrutura.

Os resultados apresentados na Fig.3 indicam claramente que a variação de  $S_V^g/S_V$  com  $G_g$  ou a de  $L_b/L_g$  com  $A_A^C$  não depende do tamanho de grão austenítico. Isto é, tanto a forma das curvas da Fig. 3 quanto os valores exibidos por aqueles parâmetros refle -

tem o mecanismo da reação.

Ambas as curvas da Fig.3 (transformação simulada e em Fe-Ni-C) exibem um máximo a um estágio intermediário do processo de espalhamento. Entretanto  $L_b/L_g$  atinge o máximo para um valor de  $A_A^b \approx 0,5$  enquanto  $S_V^b/S_V$  somente passa pelo máximo para  $G_g \approx 0,8$ . Além disso, o máximo exibido por  $L_b/L_g$  é significativamente maior do que observado no gráfico  $S_V^b/S_V^g$  vs.  $G_g$ . Isto indica que na transformação simulada tem-se um número maior de regiões parcialmente transformadas do que na liga Fe-Ni-C para um mesmo estágio de espalhamento. Isto pode ser racionalizado, lembrando que enquanto a simulação é baseada em um processo aleatório de nucleação, a reação que ocorre no Fe-Ni-C é extremamente autocatalítica, i.e., o espalhamento da reação ocorre preferencialmente entre grãos vizinhos (5), resultando portanto em um menor aumento de  $S_V^b$  ou  $L_b$  para um incremento em  $G_g$  ou  $A_A^b$ .

#### O Fracionamento dos Grãos Austeníticos

O conhecimento dos fatores que determinam o tamanho das placas de martensita é importante à elaboração de um modelo adequado à descrição e interpretação da cinética de uma reação martensítica. Numa reação típica, a variação do tamanho das placas de martensita com o progresso da transformação está relacionada à distribuição e à sequência de formação das placas. Consequentemente, será função da granulação da austenita (7) e do mecanismo da reação, esperando-se que seja drasticamente afetada pelo efeito autocatalítico (2). Numa austenita com granulação grosseira, o tamanho médio das placas de martensita decresce sensivelmente com a fração transformada,  $V_V$ . Todavia, em ligas com granulação fina o tamanho médio das placas é muito mais insensível à fração transformada,  $V_V$ , permanecendo praticamente constante até valores bem significativos de  $V_V$ .

A transformação simulada também exibe este tipo de comportamento. Isto pode ser verificado, estudando-se a variação do tamanho médio das agulhas,  $\bar{L}$ , em função do livre caminho médio na austenita,  $\bar{\lambda}_2$ . Segundo Chen e Winchell (4)  $\bar{L}$  e  $\bar{\lambda}_2$  seriam linearmente relacionados. Os gráficos da Fig.4 permitem uma comparação qualitativa do comportamento da reação simulada com o da transformação na liga Fe-Ni-C. Os resultados experimentais estão normalizados em função do tamanho de grão da austenita. O índice "2" se refere ao material bi-dimensional (transformação simulada) e o índice "3" ao material real (Fe-Ni-C).

Verifica-se por inspeção que, no início da transformação simulada,  $\bar{L}/\bar{d}_2$  decresce com  $\bar{\lambda}_2/\bar{d}_2$  mais rapidamente no material de granulação grosseira do que no material com granulação fina. Todavia, com o prosseguimento da reação observa-se no material de grão fino, o mesmo tipo de comportamento verificado com o material de grão grosso. Isto é certamente devido ao fato de que num material com granulação fina, a probabilidade de nucleação em um grão livre de martensita permanece muito maior do que é possível (para uma mesma fração transformada) quando a granulação da austenita é grosseira.

O comportamento do Fe-Ni-C (6.7), apesar do espalhamento observado, é essencialmente o mesmo visto na simulação. Todavia os valores de  $\bar{D}/\bar{d}_3$  ( $\bar{D}$  é o diâmetro médio das placas de martensita) são bastante inferiores aos obtidos na simulação. Esta discrepância pode ter várias causas, das quais pelo menos duas podem ser prontamente identificadas: autocatálise e o efeito da espessura das placas que no Fe-Ni-C não são aciculares e "infinitamente finas" como idealizadas na simulação. Outro fator importante é ignorado na simulação, é a existência de uma distribuição de tamanhos de grãos na austenita o que é típico de materiais reais. Devido aos fatores

geométricos intrínsecos à transformação martensítica, espera-se que esta distribuição afete marcadamente a morfologia da transformação.

### Considerações Finais

Um processo bastante simples foi empregado para simular a evolução da microestrutura resultante de uma transformação martensítica não-autocatalítica.

Os resultados da simulação refletem exclusivamente os fatores geométricos e probabilísticos associados à transformação.

Várias características microestruturais observadas com uma liga de Fe-31.9%Ni-0.02%C foram também detectadas na transformação simulada.

Sugere-se que a influência do tamanho do grão austenítico no espalhamento e na variação do tamanho das placas de martensita com o progresso da reação seja um efeito essencialmente geométrico.

### Agradecimentos

Este trabalho foi realizado com o apoio do Ministério do Exército e da FINEP através do Centro de Pesquisa de Materiais do IME. Agradecimentos também são devidos ao CNPq-Pronuclear por uma bolsa de estudos (U.R.A.L.).

### Referências Bibliográficas

1. J.C.Fisher, J.H.Hollomon e D.Turnbull, Trans.AIME, 185 (1949) 691.
2. D.G.Mc.Murtrie e C.L.Magee, Met.Trans., 1 (1970) 3185.
3. M.G.Mendiratta e G.Krauss, Met.Trans., 3 (1972) 1755.
4. W.Y.C.Chen e P.G.Winchell, Met.Trans., 7A (1976) 1177.
5. J.R.C.Guimarães e J.C.Gomes, Acta Metall., 26 (1978) 1591.
6. J.R.C.Guimarães e J.C.Gomes, Met.Trans., 10A (1979) 109.
7. J.R.C.Guimarães e J.C.Gomes - resultados não publicados.

## Legendas das Figuras

Fig.1 - Microestruturas Típicas.

(a) Liga Fe-31.9Ni-0.02%C)

(b) Simulação

Observe a existência de grãos não transformados em ambos os casos.

Fig.2 - Variação da fração de material em grãos parcialmente transformados com o progresso da transformação simulada.  $L_1$  é proporcional à fração volumétrica de martensita.

Fig.3 - Variação dos parâmetros microestruturais característicos do processo de espalhamento da reação. Os dados experimentais foram normalizados tomando-se por base parâmetros microestruturais da matriz austenítica.

Fig.4 - Variação de tamanho médio das placas em função da distância média livre na austenita. Os dados experimentais foram normalizados em função do tamanho de grão austenítico para permitir uma comparação imediata de ambos os conjuntos.



Fig. 1a

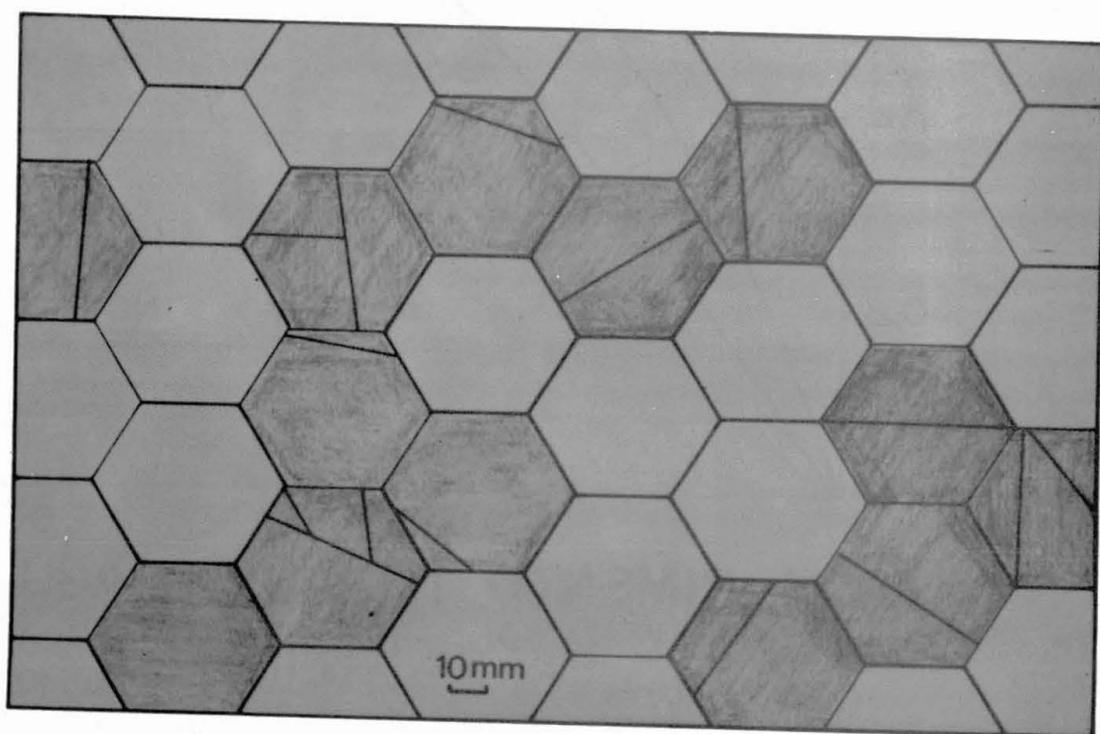


Fig. 1b

FRAÇÃO DO MATERIAL CONSTITUIDA DE GRÃOS  
PARCIALMENTE TRANSFORMADOS,  $A_A^C$

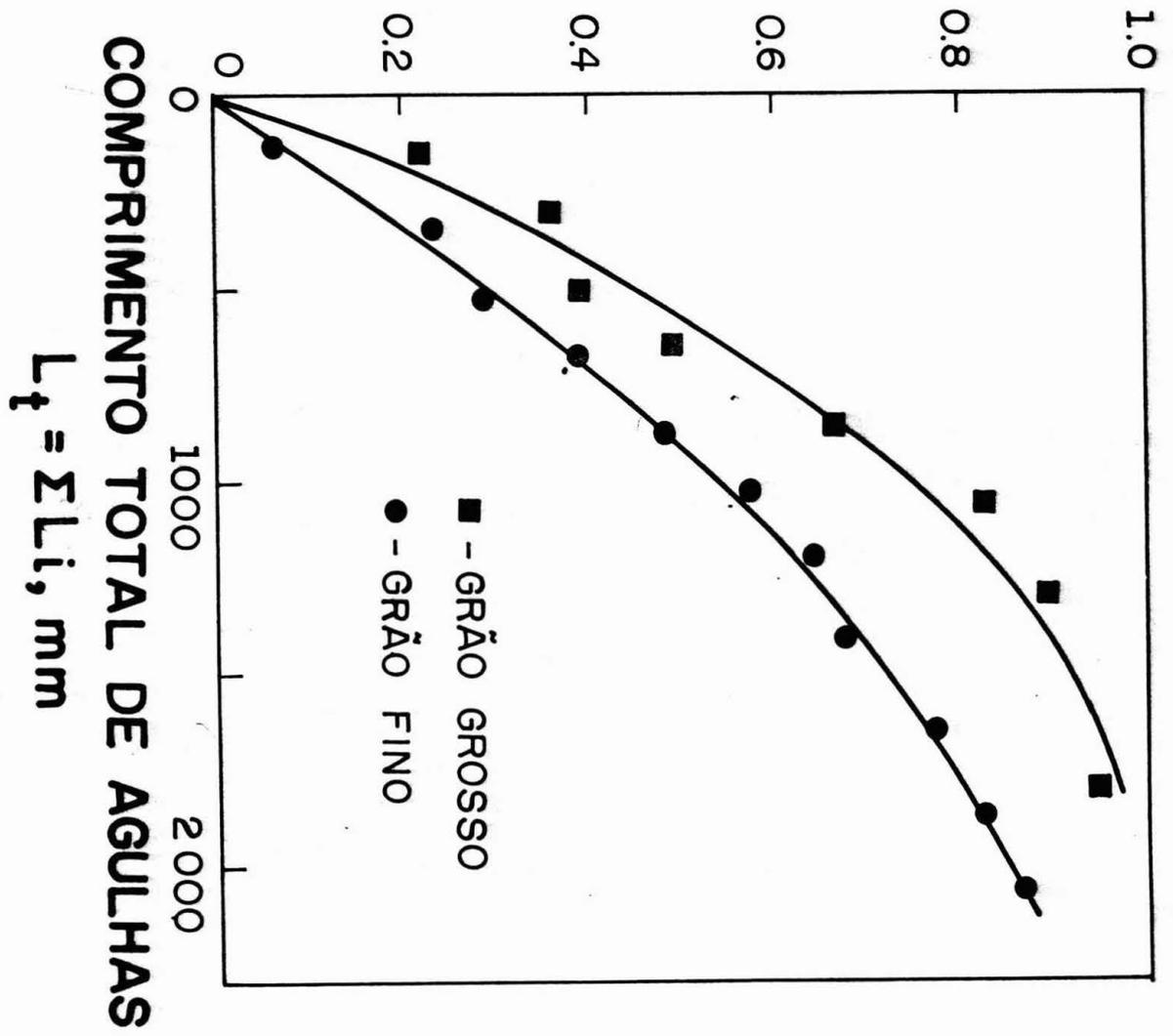


Fig. 2

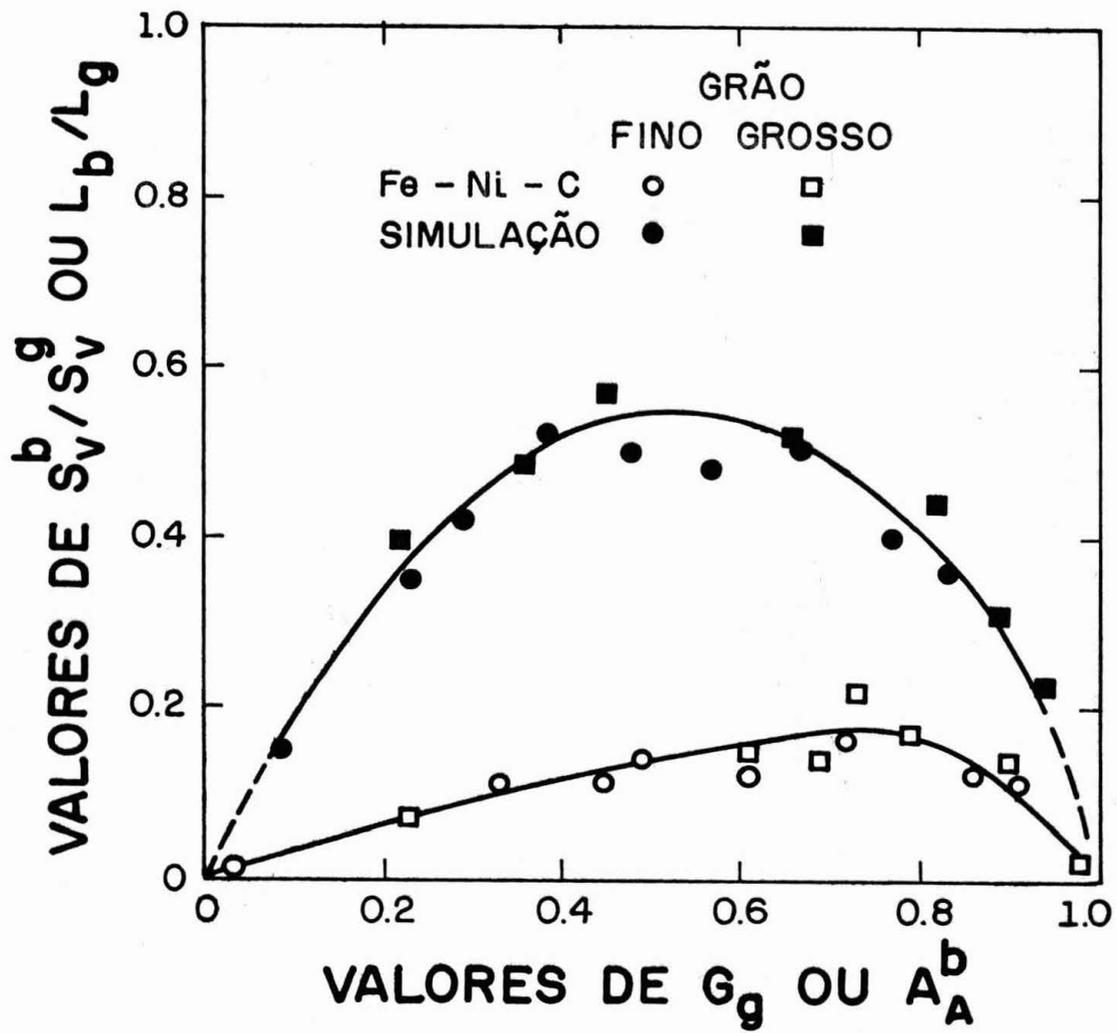


Fig. 3

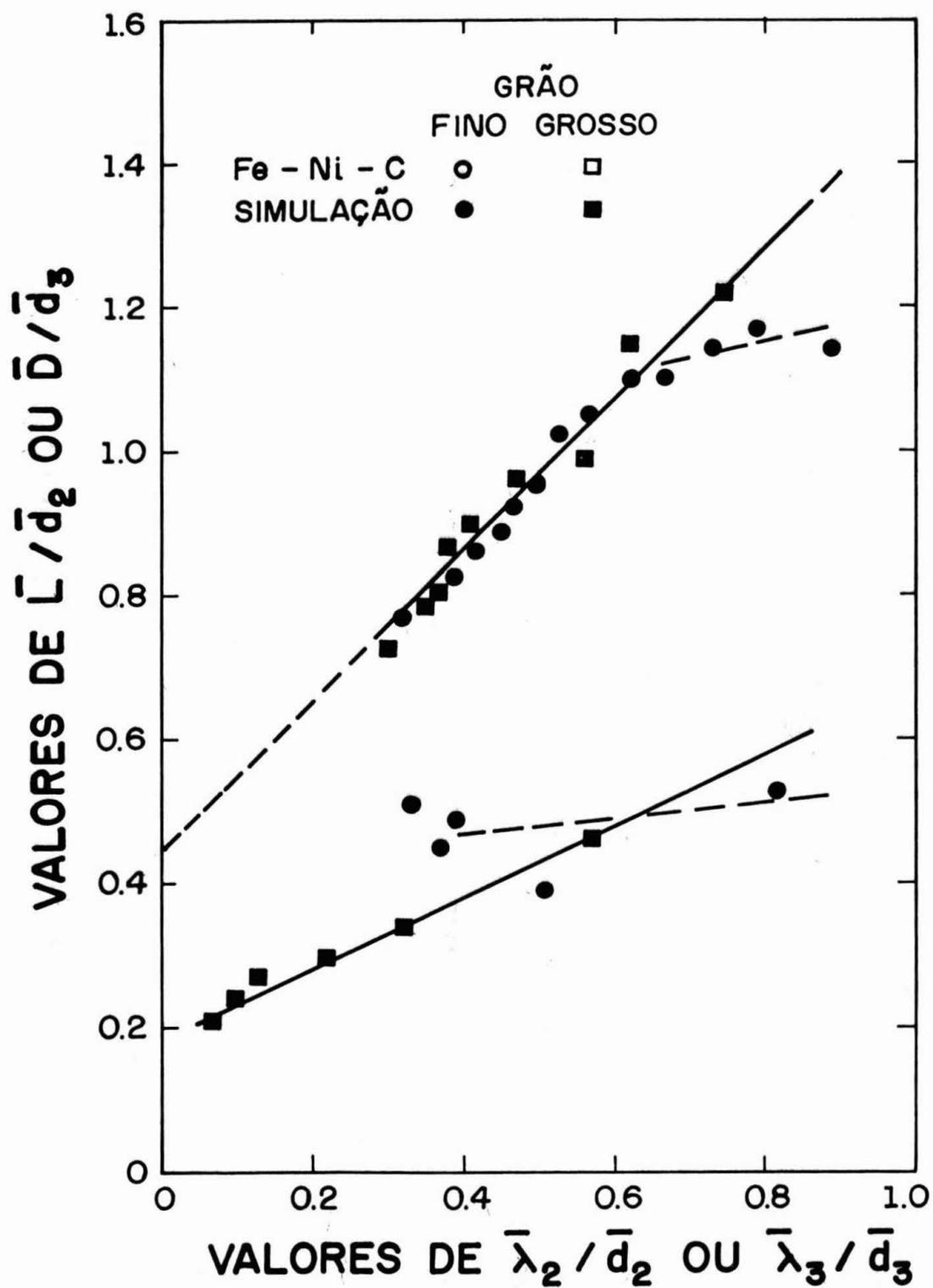


Fig. 4