



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA METALÚRGICA E DE MATERIAIS**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIA DE**  
**MATERIAIS**  
**DOUTORADO EM ENGENHARIA E CIÊNCIA DE MATERIAIS**

**TATHIANE CAMINHA ANDRADE**

**ESTUDO E DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO DE SELEÇÃO DE VARIANTES**  
**CRISTALOGRÁFICAS NA TRANSFORMAÇÃO  $\gamma \rightarrow \alpha'$  E  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  DE AÇOS COM**  
**ELEVADO TEOR DE MN**

**FORTALEZA**

**2020**

TATHIANE CAMINHA ANDRADE

ESTUDO E DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO DE SELEÇÃO DE VARIANTES  
CRISTALOGRÁFICAS NA TRANSFORMAÇÃO  $\gamma \rightarrow \alpha'$  E  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  DE AÇOS COM  
ELEVADO TEOR DE MN

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência de Materiais do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de doutor em Engenharia e Ciência de Materiais. Área de Concentração: Propriedades Físicas e Mecânicas dos Materiais

Orientador: Prof. Dr. Hamilton Ferreira  
Gomes de Abreu

FORTALEZA

2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

A571e Andrade, Tathiane Caminha.  
ESTUDO E DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO DE SELEÇÃO DE VARIANTES  
CRISTALOGRÁFICAS NA TRANSFORMAÇÃO GAMA PARA ALFA LINHA E GAMA PARA  
ÉPSILON DE AÇOS COM ELEVADO TEOR DE MN / Tathiane Caminha Andrade. – 2020.  
150 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, , Fortaleza, 2020.  
Orientação: Prof. Dr. Hamilton Ferreira Gomes de Abreu.

1. Seleção de variantes. 2. Aços ao Mn. 3. Martensita alfa linha. 4. Martensita épsilon. I. Título.  
CDD

---

TATHIANE CAMINHA ANDRADE

ESTUDO E DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO DE SELEÇÃO DE VARIANTES  
CRISTALOGRÁFICAS NA TRANSFORMAÇÃO  $\gamma \rightarrow \alpha'$  E  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  DE AÇOS COM  
ELEVADO TEOR DE MN

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência de Materiais do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de doutor em Engenharia e Ciência de Materiais. Área de Concentração: Propriedades Físicas e Mecânicas dos Materiais

Aprovada em: 18 de dezembro de 2020

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Hamilton Ferreira Gomes de  
Abreu (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Carlos Sérgio da Costa Viana  
Universidade Federal Fluminense (UFF)  
Instituto Militar de Engenharia (IME)

---

Prof. Dr. Cleiton Carvalho Silva  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Hélio Goldenstein  
Universidade de São Paulo (USP)

---

Prof. Dr. Miloslav Béres  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha incrível família, por todo o apoio durante minha caminhada acadêmica. Ao meu avô Lúcio (*in memoriam*), professor de história, que com uma biblioteca maior que a do próprio curso que lecionava na universidade, me mostrou que o estudo sempre será a solução mais certa.



## AGRADECIMENTOS

À Deus, pela minha vida e por me guiar pelos caminhos certos;

À minha incrível família, que por toda minha jornada acadêmica tem me apoiado e me dado suporte pra qualquer loucura. Mesmo não compreendendo totalmente, sabem que isso é minha paixão e topam qualquer negócio se for preciso;

Ao meu companheiro de vida, Yuri, que nas partes mais difíceis dessa caminhada, me deu o suporte que eu precisei. O físico quase doutor me ajudou bastante quando tive problemas na lógica dos meus programas. O homem maravilhoso fez tudo que pôde pra me animar e me dar mais energia pra virar noite, se preciso;

Aos meus amigos de pós-graduação Jean, Jorge, Rodrigo, Pablo, Natan, Regina, Pedro, Nathália e Miná. Obrigada por tornar meus dias mais leves até mesmo no regime remoto;

Ao Dr. João que muito me ajudou a descobrir esse mundo da textura cristalográfica. Sem você, meus programas em Matlab estariam ainda na metade do caminho ou eu estaria quase sem dormir. Uma das alternativas seria verdadeira;

Ao futuro doutor Giovani por sempre ter um tempo de discutir qualquer coisa. Mesmo longe, conseguiu se manter por perto. Muito obrigada pela sua imensa contribuição neste trabalho e por sua amizade. Junto com a Larissa, discutimos e melhoramos como pessoas e pesquisadores;

Ao Flavinho, agradeço principalmente por sua energia. Quando cheguei ele só me falava que ia dar tudo certo. E não é que deu? Obrigada também pelas suas contribuições;

Ao bolsista Breno que, sentado perto de mim, sempre tinha dúvidas bem pertinentes e que me fizeram pensar. Obrigada pela sua ajuda nos ensaios;

Aos incríveis profissionais terceirizados da UFC que fazem nosso local de trabalho ser maravilhoso. Obrigada pelos ensinamentos de vida, em especial à Edleusa, à D. Antônia e ao Roger;

Ao professor Willys, que nunca foi meu professor de disciplina, mas foi professor de vida. Tem gente que nasce com um dom e o dele é o ensino;

Aos professores que formam minha banca. Obrigada pelo seu tempo e disposição em fazer da minha tese um estudo melhor! Aos professores Viana e Hélio, fico feliz de terem aceitado o convite. Muita admiração por quem trabalha a tantos anos no ramo. Ao professor Cleiton, que incrivelmente foi da minha banca de TCC, mestrado e qualificação de doutorado. Tenho certeza que as correções serão para a melhoria do trabalho. Ao professor Milo, que além

da minha banca, se dispôs a me ajudar durante o trabalho. Obrigada pelos ensinamentos;

E, por último, à pessoa que mais me motivou para esta tese ser concluída. Obrigada ao meu orientador, professor Hamilton. Quando cheguei, há 2 anos e meio atrás, foi um recomeço. Professor, obrigada por me receber de braços abertos em um momento que nem eu sabia se ia conseguir. O senhor me motivou a ir mais longe. Obrigada por sentar comigo e responder às dúvidas mais simples. Por fazer do LACAM um ambiente solícito pra qualquer discussão! Por ter feito nossas sextas feiras mais descontraídas, com os seminários que nos alimentam de conhecimento. Também, por me motivar a terminar e comemorar cada sucesso que tive durante a tese. O senhor foi mais que um professor e um orientador, foi uma inspiração pra mim. Obrigada;

Além disso, queria agradecer também às instituições e laboratórios que fizeram ser possível esse trabalho:

Aos desenvolvedores do template desta tese em Overleaf – Latex conforme às normas da ABNT utilizadas pela UFC;

À FAI, pelas ligas de Mn utilizados nesta tese;

Ao LPTS e ao Laboratório de Ensaio Mecânicos (LEM) da UFC, pela utilização de equipamentos indispensáveis para este estudo;

Ao LPC, em especial à Úrsula, por compartilhar o que fosse necessário para ajudar os doutorandos vizinhos;

À Central Analítica-UFC/CT-INFRA/MCTI-SISNANO/Pró-Equipamentos CAPES, onde foram feitas às análises de MEV e EBSD;

Ao Laboratório de Transformações de Fases da USP, pelos ensaios de dilatométrica;

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, FUNCAP e CNPQ pelo apoio financeiro à essa e tantas outras pesquisas. Que nossas pesquisas nunca deixem de ser financiadas. Por trás de toda inovação tecnológica, existem anos de estudo científico.

“A distância mais curta entre dois pontos pode ser a linha reta, mas é nos caminhos curvos que se encontram as melhores coisas da vida.”

(Lygia Fagundes Telles)

## RESUMO

Os materiais policristalinos possuem uma propriedade conhecida como textura cristalográfica. Pode-se defini-la como uma orientação preferencial dos cristais de um material. Materiais que apresentam textura podem apresentar propriedades, tais como mecânicas, elétricas e magnéticas que variam com essa orientação. A relação de orientação entre fases também é uma propriedade importante a ser investigada e isso pode ser realizado através da textura das fases mãe e produto. Os aços com Mn podem formar diversas fases importantes, inclusive martensitas  $\alpha'$  e  $\epsilon$ . A textura e a relação de orientação entre essas fases produto e mãe (austenita) ainda podem ser melhor compreendidas. Este trabalho busca a análise da seleção de variantes na relação de orientação em aços com adições de Mn (liga 1 com 29Mn-0,15C, liga 2 com 20Mn-0,2C, liga 3 com 11Mn-0,2C e liga 4 com 5Mn-0,15C). Esse estudo foi dividido em duas seções. A primeira foi de caracterização dos materiais, ensaio de compressão a quente para induzir a seleção de variantes e análise de relação de orientação, para descrever o comportamento das martensitas formadas. Nesta seção, os resultados de caracterização mostraram que a liga 1 inicialmente com austenita e martensita  $\epsilon$ , transformada por deformação, após compressão apresentou apenas austenita. Liga 2 e liga 3 possuíam martensita  $\epsilon$  antes e depois da compressão e liga 3 apresentou martensita  $\alpha'$  também. Liga 4 apresentou uma microestrutura composta inteiramente de martensita  $\alpha'$ . As relações de orientação estudadas nesses materiais foram de Kurdjumov-Sachs entre austenita e martensita  $\alpha'$ , Shoji-Nishiyama entre austenita e martensita  $\epsilon$  e Burgers entre martensita  $\alpha'$  e martensita  $\epsilon$ . A segunda seção foi a de desenvolvimento, avaliação comparativa e aplicação dos programas de seleção de variantes, onde foi possível simular a seleção de variantes de materiais sujeitos à tensão uniaxial externa. Os materiais analisados possuíam valores crescentes de Mn, sendo possível, a análise de aços que apresentaram apenas martensita  $\alpha'$ , apenas martensita  $\epsilon$  e aquele que apresentou as duas transformações martensíticas. Os modelos utilizados nesta tese foram o de Patel-Cohen e o de Humbert, para as transformações martensíticas  $\alpha'$  e  $\epsilon$ . As análises comparativas com artigos já publicados mostraram que foi possível melhorar o código do modelo de Patel-Cohen, corrigindo um erro no cálculo das variantes. Para a aplicação dos modelos de seleção de variantes nos aços de alto Mn, os resultados mostraram que os programas desenvolvidos obtiveram bons resultados, conseguindo prever os locais das variantes com mais alta intensidade para as duas martensitas.

**Palavras-chave:** Seleção de variantes. Aços ao Mn. Martensita  $\alpha'$ . Martensita  $\epsilon$ .

## ABSTRACT

Polycrystalline materials exhibit a property known as crystallographic texture. It is defined as the preferred orientation of the crystals of a material. Textured materials display other properties, such as mechanical, electrical and magnetic qualities, that may vary along with the orientation. The orientation relationship between phases is also an important property to be investigated, which can be done through the analyses of the texture of the mother and product phases. Mn steels can form several important phases, including martensites  $\alpha'$  and  $\epsilon$ . The texture and the orientation relationship between the product phase and the mother phase (austenite) can still be better understood. This work aims to analyze the variant selection on orientation relationship in steels with Mn additions (alloy 1 with 29Mn-0.15C, alloy 2 with 20Mn-0.2C, alloy 3 with 11Mn-0.2C, and alloy 4 with 5Mn-0.15C). This study was divided into two sections. The first section includes the material characterization, a hot compression test to induce the variant selection, and the analysis of the orientation relationship, all to describe the behavior of martensites. In this section, the results from the characterization showed that alloy 1, initially with austenite and  $\epsilon$ -martensite induced by deformation, presented only austenite after compression. Both alloy 2 and alloy 3 had  $\epsilon$ -martensite before and after compression, whereas alloy 3 also presented  $\alpha'$ -martensite. Alloy 4 presented a microstructure composed entirely of  $\alpha'$ -martensite. We characterized the orientation relationship studied in these materials as Kurdjumov-Sachs between austenite and  $\alpha'$ -martensite, Shoji-Nishiyama between austenite and  $\epsilon$ -martensite, and Burgers between  $\alpha'$ -martensite and  $\epsilon$ -martensite. The second section comprises the development, comparative evaluation and application of variant selection programs, in which it was possible to simulate the variant selection of materials subject to external uniaxial stress. The analyzed materials had gradual Mn values, which enabled the categorization of steels in presenting only  $\alpha'$ -martensite, only  $\epsilon$ -martensite, and both martensitic transformations. In this thesis, we used the models of Patel-Cohen and Humbert for the martensitic transformations  $\alpha'$  and  $\epsilon$ , respectively. Comparative analyses with already published articles showed that it was possible to improve the code of the Patel-Cohen model, correcting an error in the calculation of the variants. For the application of the variant selection models in high-Mn steels, the results showed that the developed programs yield good results, which made it possible to predict the locations of the variants with the highest intensity for the two martensites.

**Keywords:** Variant selection. High Mn steels.  $\alpha'$ -martensite.  $\epsilon$ -martensite.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Alongamento de fratura em função da resistência à tração máxima para aços para aplicações automotivas. . . . .	25
Figura 2 – Imagens de MET mostrando o ultrarefino de grão austenítico em aço : a) Tamanho de grão próximo a 2 $\mu\text{m}$ e b) Macla de 1nm de espessura em um grão de 1,4 $\mu\text{m}$ . . . . .	27
Figura 3 – Diagrama Fe-Mn . . . . .	27
Figura 4 – Diagrama de fases metaestáveis para o sistema Fe-Mn-C . . . . .	28
Figura 5 – Micrografias óticas de vários tipos de martensitas em ligas ferrosas. (a) ripa de $\alpha'$ (Fe-7%Ni-0,22%C), (b) $\alpha'$ butterfly (Fe-20%Ni-0,73%C), (c) $\alpha'$ em placa (225) $\gamma$ (Fe-8%Cr-0,9%C), (d) $\alpha'$ lenticular (Fe-29%Ni- 0,26%C), (e) $\alpha'$ em placa fina (Fe-31%Ni-0,23%C), (f) martensita $\epsilon$ (Fe-24%Mn). . . . .	30
Figura 6 – Faixas de EFE para transformação, maclação por deformação e deslizamento de discordâncias em ligas ferrosas CFC para liga de Fe-(20-32)%Mn-Cr-C (em % p.), ligas de Co-(15-45)%Ni-14Cr-Mo (em % p.), aços TWIP e aço Fe-18%Cr-10%Ni-C-N.. . . .	31
Figura 7 – Esquemático de escorregamento em um cristal . . . . .	32
Figura 8 – Única discordância em aresta $\frac{1}{2} \cdot [110]$ em cristal cúbico de face centrada . . . . .	33
Figura 9 – Tetraedro de Thompson para o sistema de escorregamento de um cristal CFC . . . . .	34
Figura 10 – Análise de EBSD para uma amostra deformada a 900°C: a) mapa de orientação da austenita, b) mapa de orientação da martensita $\epsilon$ com austenita em cinza, c) análise da figura de polos da austenita e martensita e d) perfil de misorientation paralelo à direção marcada . . . . .	37
Figura 11 – Hierarquia da microestrutura de uma martensita em placas . . . . .	38
Figura 12 – Esquemático das orientações das variantes K-S em um pacote de martensita . . . . .	39
Figura 13 – Esquemático da morfologia da martensita para uma liga Fe-C com a) baixo carbono (0-0,4% C) e b) alto carbono (0,6%C) . . . . .	40
Figura 14 – Esquemático mostrando a) cristais de austenita e martensita como esferas, b) cristal de austenita após a deformação de Bain e c) formação de linha invariante após a combinação da deformação de Bain com rotação de corpo rígido. . . . .	41

Figura 15 – Ilustração esquemática da teoria fenomenológica da transformação martensítica: a) cristal de austenita, b) após uma deformação de plano invariante, c) após duas deformações de plano invariante, d) após maclagem e e) após deslizamento de planos . . . . .	43
Figura 16 – Martensita com maclas formadas em sua subestrutura. Imagem de microscopia de transmissão de alta resolução . . . . .	44
Figura 17 – Esquemático relacionando a orientação dos grãos com a textura dos materiais: a) material com textura e b) material sem textura . . . . .	45
Figura 18 – Esquemático mostrando a orientação do plano basal (0001) de uma estrutura hexagonal . . . . .	45
Figura 19 – Representação dos polos $\{100\}$ de um cristal cúbico em uma projeção estereográfica: a) Cristal em uma esfera, b) projeção dos polos $\{100\}$ no plano equatorial e c) figura de polo $\{100\}$ e a representação de $\alpha$ e $\beta$ para o plano $\{100\}$ . . . . .	46
Figura 20 – Esquemático mostrando as três rotações na convenção de Bunge a partir das quais as coordenadas da amostra coincidem com as coordenadas do cristal . . . . .	47
Figura 21 – Ábaco da seção de $\varphi_2 = 45^\circ$ mostrando as posições das principais orientações. . . . .	48
Figura 22 – Representação esquemática da orientação inicial da fase-mãe (hexágonos), variantes de Bain (triângulos) e variantes KS (círculos) . . . . .	49
Figura 23 – Diagrama de Schumann modificado mostrando as faixas de composições escolhidas. . . . .	51
Figura 24 – Fluxograma da Metodologia . . . . .	53
Figura 25 – Esquemático das dimensões da peça para ensaio de dilatométrica: a) vista isométrica, e b) vista lateral e c) vista superior. Escala 10:1. Medidas em mm . . . . .	55
Figura 26 – Ciclo térmico medido no ensaio de dilatométrica . . . . .	55
Figura 27 – Cristal CFC (austenita) e o sistema de referência $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ . Círculos roxos representam os átomos no cristal . . . . .	57
Figura 28 – Diferença entre mudança de coordenadas e matriz de deformação homogênea . . . . .	59
Figura 29 – Esquemático para o código MatrizJ . . . . .	61
Figura 30 – Aço martensítico com nenhuma austenita residual: a) mapa de orientação da martensita e b) austenita reconstruída . . . . .	62
Figura 31 – Esquemático do código MatrizG . . . . .	64

Figura 32 – Esquemático dos componentes de uma tensão aplicada . . . . .	64
Figura 33 – DRX das amostras como recebidas: a) Liga 1 (29Mn-0.15C) e Liga 2 (20Mn-0.15C), b) Liga 3 (11Mn-0.2C) e Liga 4 (5Mn-0.15C) . . . . .	69
Figura 34 – Caracterização microestrutural da Liga 1: a) Imagem de elétrons secundários, b) Contraste de banda e c) identificação de fases por EBSD . . . . .	72
Figura 35 – Caracterização microestrutural da Liga 2: a) e b) mostram regiões distintas da amostra com presença de martensita $\epsilon$ . . . . .	72
Figura 36 – Caracterização microestrutural da Liga 3: a) Imagem de elétrons secundários, b) Contraste de banda e c) identificação de fases por EBSD . . . . .	73
Figura 37 – Caracterização microestrutural da Liga 3: a) Imagem de elétrons secundários ressaltando a martensita $\epsilon$ e b) detalhe da martensita $\epsilon$ . . . . .	74
Figura 38 – Caracterização microestrutural da Liga 4: a) Imagem por MO, b) Imagem de elétrons secundários . . . . .	74
Figura 39 – Dilatação relativa no resfriamento . . . . .	75
Figura 40 – Variação da temperatura Néel ( $T_N$ ) e $M_i$ com a concentração de Mn para ligas binárias Fe-Mn. Os símbolos $\gamma_P$ , $\gamma_{AF}$ e $\epsilon_P$ representam austenita paramagnética, austenita antiferromagnética e martensita $\epsilon$ paramagnética, respectivamente. As linhas verticais em vermelho representam as composições aproximadas estudadas neste trabalho . . . . .	76
Figura 41 – Dilatação relativa no aquecimento . . . . .	77
Figura 42 – Imagem de contraste de banda e ângulos de Euler para: a) Liga 1 (29Mn-0,15C) e b) Liga 4 (5Mn-0,15C)) . . . . .	78
Figura 43 – Mapa de fases com os respectivos índices de indexação para: a) Liga 2 (20Mn-0,15C) e b) Liga 3 (11Mn-0,2C) . . . . .	79
Figura 44 – Mapa de contraste de banda e KAM para a fase austenítica da a) Liga 2 (20Mn-0,15C), b) Liga 3 (11Mn-0,2C) e c) histograma . . . . .	80
Figura 45 – Traços dos planos de deslizamento $\{111\}$ e fatores de Schmid para: a) Liga 2 (20Mn-0,15C) e b) Liga 3 (11Mn-0,2C); Martensita $\epsilon$ em cinza e martensita $\alpha$ em branco. . . . .	81
Figura 46 – Histograma de MAD para: a) Liga 1 (29Mn-0,15C) , b) Liga 2 (20Mn-0,15C), c) Liga 3 (11Mn-0,2C) e d) Liga 4 (5Mn-0,15C) . . . . .	82

Figura 47 – Estudo da relação de orientação para liga 2 entre austenita-mãe e martensita $\epsilon$ : a) Mapa de contraste de banda e contornos de grão indicando o desvio segundo a relação S-N, b) Histograma do desvio, em graus, dos contornos de grão segundo a relação S-N; figuras de polos $(111)_{\gamma}, (0002)_{\epsilon}, (110)_{\gamma}, (11\bar{2}0)_{\epsilon}$ para c) grão 1, d) grão 2 e e) grão 3. . . . .	83
Figura 48 – Estudo da relação de orientação para liga 3 entre austenita-mãe e martensita $\epsilon$ : a) Mapa de contraste de banda e contornos de grão indicando o desvio segundo a relação SN, b) Histograma do desvio, em graus, dos contornos de grão segundo a relação SN; figuras de polos para a relação SN para: c) grão 1, d) grão 2 e e) grão 3 . . . . .	85
Figura 49 – Figuras de polos para análise da relação de orientação K-S para liga 3 entre austenita-mãe e martensita $\alpha'$ , pontos em azul representam variantes da martensita $\alpha'$ , pontos em vermelho representam austenita e pontos pretos sem preenchimento representam as possível localizações das variantes segundo a relação KS, para: a) grão 1 e b) grão 2 . . . . .	86
Figura 50 – Estudo da relação de orientação para liga 3 entre martensita $\epsilon$ e martensita $\alpha$ , mostrando a relação de Burgers segundo as figuras de polos para: a) grão 1 e b) grão 2 . . . . .	87
Figura 51 – Figura de polos (100) para amostra deformada a 400°C: a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (8 variantes positivas) e c) experimental . . . . .	88
Figura 52 – Figura de polos (100) para amostra deformada a 400°C: a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (8 variantes positivas) . . . . .	89
Figura 53 – Figura de polos (100) para amostra deformada a 600°C: a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (9 variantes positivas) e c) experimental . . . . .	90
Figura 54 – Figura de polos (100) para amostra deformada a 600°C: a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (9 variantes positivas) . . . . .	91

Figura 55 – Análise da seleção de variantes na liga 2 nos grãos marcados: a) Martensita $\epsilon$ em vermelho e mapa de ângulos de Euler da austenita, b) Austenita em amarelo e mapa de ângulos de Euler da martensita $\epsilon$ ; figuras de polos para $\{0002\}$ e $\{10-10\}$ no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado,e) grão 2, experimental, f) grão 2, simulado,g) grão 3, experimental, h) grão 3, simulado.	95
Figura 56 – Análise da seleção de variantes na liga 3 nos grãos marcados: a) Mapa de ângulos de Euler da austenita e contraste de banda, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita $\epsilon$ e contraste de banda; figuras de polos para $\{0002\}$ e $\{10-10\}$ no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado,e) grão 2, experimental, f) grão 2, simulado,g) grão 3, experimental, h) grão 3, simulado. . . . .	97
Figura 57 – Análise da seleção de variantes na liga 3 nos grãos marcados: a) Mapa de ângulos de Euler da austenita e contraste de banda, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita $\alpha$ e contraste de banda; figuras de polos para $\{100\}$ no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado com apenas as variantes positivas,e) grão 1, simulado com todas as variantes, f) grão 2, experimental, g) grão 2, simulado com apenas as variantes positivas,h) grão 2, simulado com todas as variantes. . . . .	100
Figura 58 – Reconstrução da austenita-mãe para a liga 4 feita pelos programas: a) Matlab em Mtex e b) ARPGE . . . . .	101
Figura 59 – Análise da seleção de variantes na liga 4 nos grãos marcados: a) Mapa de reconstrução da austenita-mãe realizada em Mtex, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita $\alpha$ ; figuras de polos para $(100)$ no grão 1 para c) experimental, d) simulado com apenas as variantes positivas,e) simulado com todas as variantes; e grão 2 para f) experimental, g)simulado com apenas as variantes positivas, h) simulado com todas as variantes. . . . .	102
Figura 60 – Matrizes de Variantes para o Sistema Cúbico . . . . .	150

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – A temperatura inicial de transformação martensítica e sua respectiva dureza Vickers para martensita formadas em diversos materiais . . . . .	35
Tabela 2 – Principais relações de orientação entre CFC e CCC . . . . .	38
Tabela 3 – Componentes de textura em metais CFC laminados . . . . .	48
Tabela 4 – Composição química dos materiais recebidos de alto teor de Mn . . . . .	52
Tabela 5 – Quatro possíveis variantes formadas na transformação $\gamma \rightarrow \varepsilon$ e suas respectivas matrizes de deformação . . . . .	66
Tabela 6 – Energia de Falha de Empilhamento (EFE) calculada e fases encontradas para as ligas como recebidas . . . . .	70
Tabela 7 – Temperaturas de Início de Transformação Martensítica calculadas . . . . .	70
Tabela 8 – Temperaturas de Início de Transformação Martensítica por Dilatometria . . . . .	75
Tabela 9 – Temperaturas de início de austenitização, no aquecimento, por dilatometria . . . . .	77
Tabela 10 – Orientação (ângulos de Euler) da martensita $\alpha$ para amostra deformada a $400^{\circ}\text{C}$ simulada no programa de Kundu e no <i>matrizJ</i> e suas respectivas energias . . . . .	90
Tabela 11 – Orientação (ângulos de Euler) da martensita $\alpha$ simulada no programa de Kundu e no <i>matrizJ</i> e suas respectivas energias . . . . .	92
Tabela 12 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita na liga 2 medida em cada grão . . . . .	96
Tabela 13 – Variantes selecionadas pela simulação e suas respectivas orientações . . . . .	96
Tabela 14 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita na liga 3 medida em cada grão . . . . .	98
Tabela 15 – Variantes selecionadas para liga 3 e martensita $\varepsilon$ e suas respectivas orientações . . . . .	98
Tabela 16 – Parâmetros calculados para transformação $\gamma \leftrightarrow \alpha'$ . . . . .	99
Tabela 17 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita-mãe reconstruída na liga 4 medida em cada grão . . . . .	101
Tabela 18 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\varepsilon$ simuladas na liga 2 e suas respectivas energias . . . . .	117
Tabela 19 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\varepsilon$ simuladas na liga 3 e suas respectivas energias . . . . .	118
Tabela 20 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\alpha'$ simuladas na liga 3 e grão 1, com suas respectivas energias . . . . .	119
Tabela 21 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\alpha'$ simuladas na liga 3 e grão 2, com suas respectivas energias . . . . .	120

Tabela 22 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\alpha'$ simuladas na liga 4 e grão 1, com suas respectivas energias . . . . .	121
Tabela 23 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita $\alpha'$ simuladas na liga 4 e grão 2, com suas respectivas energias . . . . .	122

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

$M_f$	temperatura de fim de transformação martensítica
<i>EBS</i>	<i>electron backscatter diffraction</i> / difração de elétron retroespalhado
<i>FDOC</i>	<i>orientation distribution function</i> / função de distribuição de orientações cristalográficas
<i>FEG</i>	<i>field emission gun</i> / canhão de emissão de campo
<i>HF</i>	<i>horizontal field width</i> / comprimento do campo horizontal
<i>IL</i>	<i>invariant line strain</i> / linha de deformação invariante
<i>KAM</i>	<i>Kernel average misorientation</i> / desorientação média de Kernel
<i>MAD</i>	<i>mean angle deviation</i> / desvio médio de ângulo
<i>ND</i>	<i>normal direction</i> / direção normal
<i>RD</i>	<i>rolling direction</i> / direção de laminação
<i>TD</i>	<i>transverse direction</i> / direção transversal
<i>TRIP</i>	<i>transformation induced plasticity</i> / plasticidade induzida por deformação
<i>TWIP</i>	<i>twining induced plasticity</i> / plasticidade induzida por maclação
CCC	cúbica de corpo centrada
CFC	cúbica de face centrada
DRX	difração de raios-X
EFE	energia de falha de empilhamento
G-T	Greninger-Troiano
HC	hexagonal compacta
K-S	Kurdjumov-Sachs
MEV	microscopia eletrônica de varredura
MO	microscopia óptica
N-W	Nishiyama-Wassermann
S-N	Shoji-Nishiyama
TCC	tetragonal de corpo centrado
TFTM	Teoria Fenomenológica da Transformação Martensítica

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\gamma$	Austenita
$\alpha'$	Martensita $\alpha'$
$\varepsilon$	Martensita $\varepsilon$
$\sigma$	Tensão normal
$\tau$	Tensão de cisalhamento
$F$	Força
$A$	Área
$(FBF)$	Deformação de Bain
$(FJF)$	Rotação de corpo rígido
$(FSF)$	Deformação de transformação
$(FPF)$	Deformação de volume
$(FQF)$	Deformação de plano invariante
$\mathbf{d}$	Vetor de deslocamento unitário
$\mathbf{p}$	Normal unitária
$I$	Matriz identidade
$\{\Psi, \Theta, \Phi\}$	Ângulos de Euler, definição de Roe
$\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$	Ângulos de Euler, definição de Bunge
$a_\gamma$	Parâmetro de rede da austenita
$a_\alpha$	Parâmetro de rede da martensita $\alpha'$
$a_\varepsilon$	Parâmetro de rede da martensita $\varepsilon$
$(BJA)$	Matriz de mudança de coordenadas da base A para a base B
$(BJ'A)$	Matriz transposta à $(BJA)$
$(AJB)$	Matriz de mudança de coordenadas da base B para a base A
$(AJ'B)$	Matriz transposta à $(AJB)$
$(ASA)$	Matriz de deformação homogênea
$(\alpha C \gamma)$	Matriz de correspondência entre as fases austenita e martensita $\alpha'$

$G$	Matriz de orientação
$(\gamma G \gamma)$	Matriz de orientação da austenita
$(\alpha G \alpha)$	Matriz de orientação da martensita $\alpha'$
$(\varepsilon G \varepsilon)$	Matriz de orientação da martensita $\varepsilon$
$U$	Energia de interação
$\varepsilon$	Tensor de deformação
$\sigma$	Tensor de tensão
$m$	Fator de Schmid
$T_i$	Matrizes de simetria
$T_N$	Temperatura Néel
$A_i$	Temperatura de início de austenitização
$A_f$	Temperatura de fim de austenitização
$(\alpha J \gamma)$	Matriz de transformação da austenita para martensita $\alpha'$
$(\gamma J \alpha)$	Matriz de transformação da martensita $\alpha'$ para austenita

## SUMÁRIO

1	<b>INTRODUÇÃO</b>	22
2	<b>OBJETIVOS</b>	24
2.1	Objetivos Específicos	24
3	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	25
3.1	Aços com alto teor de Mn	25
3.1.1	<i>Mecanismos de Aumento de Resistência em Aços Alto Mn</i>	29
3.2	Escorregamento em Cristais CFC	31
3.3	A Transformação Martensítica	34
3.3.1	<i>Relações de Orientação</i>	35
3.3.2	<i>A Teoria Fenomenológica da Transformação Martensítica</i>	41
3.4	Textura Cristalográfica e Seleção de Variantes	44
3.4.1	<i>Seleção de Variantes</i>	48
4	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	51
4.1	Materiais	51
4.2	Metodologia	53
4.2.1	<i>Caracterização Inicial</i>	53
4.2.2	<i>Notação e Convenções para Cálculos de Variantes</i>	56
4.2.3	<i>Modelo de Seleção de Variantes</i>	59
5	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	68
5.1	Caracterização, Compressão e Análise das Amostras	68
5.1.1	<i>Caracterização dos Materiais Como Recebidos</i>	68
5.1.2	<i>Caracterização das Amostras Comprimidas</i>	78
5.1.3	<i>Estudo da Relação de Orientação</i>	82
5.2	Desenvolvimento, Avaliação Comparativa e Aplicação dos Programas de Seleção de Variantes	88
5.2.1	<i>Modelo de Seleção de Variantes</i>	88
5.2.2	<i>Seleção de Variantes das Amostras Submetidas à Compressão</i>	94
6	<b>CONCLUSÃO</b>	103
7	<b>SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS</b>	105
	<b>REFERÊNCIAS</b>	106

<b>APÊNDICES</b> . . . . .	113
<b>APÊNDICE A</b> – Mudança de Volume nas Transformações de Fases em Aços com Teor de Mn . . . . .	113
<b>APÊNDICE B</b> – Dados Gerados pelos Programas de Simulação de Seleção de Variantes . . . . .	116
<b>APÊNDICE C</b> – Códigos-fontes do programa MatrizJ . . . . .	123
<b>APÊNDICE D</b> – Códigos-fontes do programa Variantes . . . . .	128
<b>APÊNDICE E</b> – Código-fonte do programa MatrizG . . . . .	136
<b>APÊNDICE F</b> – Códigos-fontes das subrotinas utilizadas como funções nos programas principais . . . . .	138
<b>ANEXOS</b> . . . . .	149
<b>ANEXO A</b> – Variantes Cristalográficas . . . . .	150

## 1 INTRODUÇÃO

A textura de materiais policristalinos é uma propriedade que se destaca em diversas aplicações, por exemplo, na estampagem de materiais e na fabricação de aços elétricos. Essa propriedade pode ser definida em relação à orientação dos grãos da estrutura cristalina. Caso exista uma orientação preferencial, pode-se dizer que o material possui textura. Caso contrário, em orientação aleatória, o material não possui textura.

Essa propriedade pode sofrer alterações de acordo com o nível de deformação, taxa de deformação, modo de deformação, tratamento térmico, tempo de tratamento e temperatura. Assim como a textura de fases, como a martensita podem sofrer alterações de acordo com as características da fase mãe (austenita).

Neste caso, os aços podem possuir fases à temperatura ambiente com estruturas cristalinas cúbica de corpo centrada (CCC) e/ou cúbica de face centrada (CFC). Mais especificamente, os aços que possuem transformações martensíticas, transformam a austenita CFC em martensita CCC ou tetragonal de corpo centrado (TCC), dependendo do percentual de carbono na sua composição. Estas possuem maior resistência mecânica e, dependendo do teor de carbono da liga, podem ser uma estrutura mais dura e frágil do que a austenita CFC.

Em aços com alto teor de Mn, uma categoria de aços avançados com aplicações desde a indústria automobilística até transporte de gases à temperaturas criogênicas, pode existir ainda uma segunda transformação martensítica, em que a austenita CFC se transforma em martensita hexagonal compacta (HC). Essa transformação pode ocorrer dependendo dos teores de elementos de liga presentes no material.

A transformação da austenita para a martensita  $\alpha'$  já foi objeto de estudo de diversos trabalhos científicos. Atualmente, as relações de orientação de Kurdjumov-Sachs (K-S), Bain e Nishiyama-Wassermann (N-W) são as mais comuns para relacionar a fase mãe (austenita) e a martensita  $\alpha'$ . Além dessas relações, Nolze mostrou que as relações entre austenita/martensita devem ser irracionais. Portanto, a maioria dos estudos que utilizam Kurdjumov-Sachs (K-S), Bain ou Nishiyama-Wassermann (N-W) como base, podem ter diferenças de resultados.

Em relação à transformação austenita para a martensita  $\varepsilon$ , a relação de orientação é racional e segue ao descrito por Shoji-Nishiyama (S-N). Além disso, nesses aços pode existir a transformação  $\varepsilon \rightarrow \alpha'$ .

Uma teoria que tenta explicar melhor as diversas características da transformação martensítica é a Teoria Fenomenológica da Transformação Martensítica. Essa teoria explica o

porquê da formação de uma linha invariante entre martensita  $\alpha'$  e austenita, o porquê dos planos de hábito serem irracionais (o que coincide com os experimentos de Nolze) e explica como são formadas as subestruturas encontradas nas martensitas  $\alpha'$  (maclas ou discordâncias). Além disso, as relações de orientação são próximas das encontradas por K-S e N-W.

No sistema cúbico, a transformação de CFC para CCC dá origem a 24 possíveis orientações. Devido a fenômenos como a presença de tensão durante a transformação martensítica ou deformações antes da transformação, apenas algumas das 24 variantes aparecem na estrutura CCC. A este fato chamamos de seleção de variantes. No caso do sistema HC, isto é, transformação de CFC para HC apenas 12 variantes podem aparecer.

É de conhecimento da comunidade científica que uma determinada textura cristalográfica pode ser benéfica ou não para uma determinada propriedade do material. Por exemplo, aços para estampagem profunda devem possuir componentes de textura  $\{111\}\langle uvw \rangle$ . Bem como aços elétricos, devem possuir as componentes de Goss e Cubo para suas excelentes propriedades magnéticas. Quando o aço é deformado na fase austenita, como na laminação à quente, uma das componentes de textura típica que aparece é a componente Brass  $\{110\}\langle 112 \rangle$ . Assim, se o mecanismo de seleção de variantes for compreendido, é possível otimizar propriedades para cada aplicação específica.

Neste trabalho, aços com alto teor de manganês foram o objeto de estudo e a seleção de variantes será estudada para as duas possíveis transformações martensíticas.

## 2 OBJETIVOS

Estudar e analisar a seleção de variantes da textura cristalográfica entre as fases martensita  $\alpha'$ -austenita e martensita  $\varepsilon$ -austenita em aços com alto teor de Mn submetidos à ensaio de compressão a quente, propondo e utilizando modelos de simulação da seleção de variantes.

### 2.1 Objetivos Específicos

Desenvolver programas em linguagem Python para a resolução das equações que descrevem as transformações da austenita em martensita  $\alpha'$  (CCC) e martensita  $\varepsilon$  (HC);

Compreender a formação dos diferentes tipos de martensita em relação à microestrutura, temperaturas de transformação e relações de orientação cristalográfica;

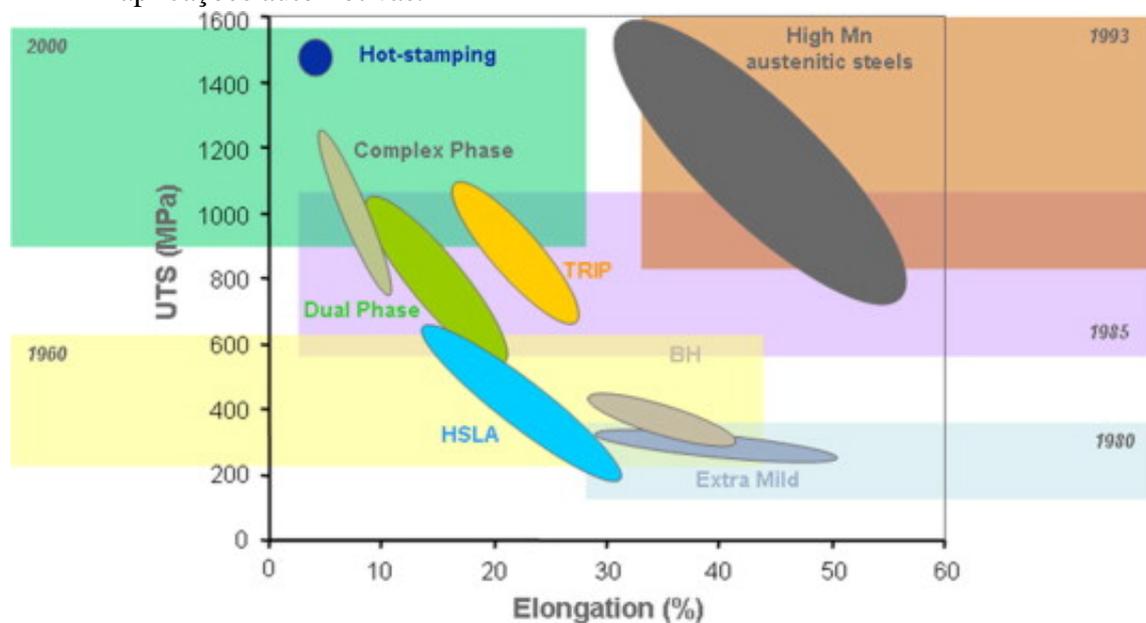
Compreender e estudar a seleção de variantes nas martensitas em aço com diferentes teores de Mn;

### 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1 Aços com alto teor de Mn

Os aços alto Mn são ligas com altas porcentagens deste elemento, geralmente acima de 12%. Aços com alto teor de Mn são comumente utilizados na indústria automobilística devido a suas propriedades que aliam bons resultados de resistência mecânica e alongamento (BOUAZIZ *et al.*, 2011), como mostra a Figura 1.

Figura 1 – Alongamento de fratura em função da resistência à tração máxima para aços para aplicações automotivas.



Fonte: Bouaziz *et al.* (2011)

Os aços com alto teor de Mn foram inicialmente propostos por Hadfield (1888), que ficaram conhecidos pelo nome de seu autor e pelas suas características de alta dureza.

É difícil descrever com precisão a dureza porque todas as amostras são excessivamente duras: na verdade, dificilmente é possível usar qualquer um deles em uma escala prática, mas tal dureza varia consideravelmente em grau, sendo mais intensa nos materiais fundidos contendo 5 a 6 % Mn, que nenhuma ferramenta tocará ou faceará.

Quarenta e um anos após o trabalho de Sir Robert Hadfield, Hall (1929) e Krivobok (1929) descreveram a microestrutura dos aços Hadfield. Esses trabalhos mostraram que uma microestrutura totalmente austenítica só era possível de ser obtida a partir de um tratamento térmico com temperaturas maiores que 500°C.

Tofaute e Linden (1936) mostraram que o percentual de carbono e manganês para estabilizar a austenita segue uma regra, mostrada na equação 3.1.

$$\%pMn + 13\%pC \geq 17 \quad (3.1)$$

Onde C e Mn são as quantidades de carbono e manganês, respectivamente, em %p.

Estudando aços ricos em Mn, Troiano e McGuire (1943) descobriram que a transformação de fases induzida por deformação nesses materiais poderia ser causada por duas martensitas com características distintas: martensita  $\alpha'$  e martensita  $\epsilon$ .

Alguns anos depois, Doepken (1952), Otte (1957) descobriram que mesmo sem a presença de martensita, alguns aços com alto Mn poderiam ter o fenômeno de aumento de dureza por deformação, mas em consequência da provável formação de maclas. Essas maclas foram confirmadas por análise de microscopia eletrônica de transmissão (MET) em outros estudos (RAGHAVAN *et al.*, 1969; ROBERTS, 1964).

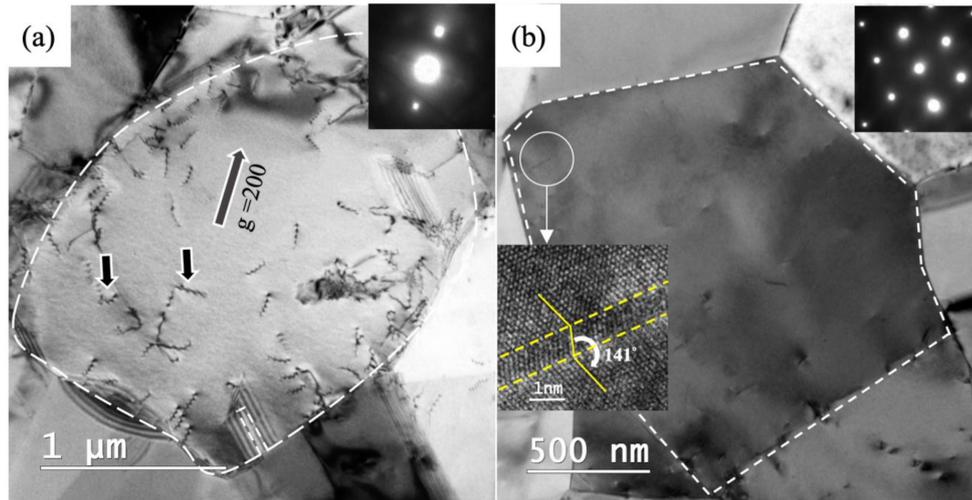
Nos anos 70, Remy e Pineau (1977) estudaram aços alto Mn com baixo teor de carbono, como ligas binárias Fe-Mn, ternárias Fe-Mn-5Cr e Fe-Mn-0,2C e quaternárias Fe-20Mn-4Cr-0,5C. Esse estudo revelou que tanto martensita  $\epsilon$  quanto as maclas formadas por deformação agem como novos obstáculos ao movimento das discordâncias. Em 1981, Charles *et al.* (1981) foi o primeiro a sugerir que esses aços pudessem ser utilizados em aplicações criogênicas.

Desde então, diversas patentes foram feitas por empresas como Kobe steel, Sumitomo, Nippon Steel, Korean Posco Company, ThyssenKrupp Stahl Germany, entre outras (BOUAZIZ *et al.*, 2011), evidenciando a provável aplicação desses materiais em indústrias automobilísticas.

Porém, a produção de aços com alto teor de Mn pode não ser uma tarefa fácil. As ligas ferro-manganês adicionadas no processo de produção para aumentar o teor de Mn do aço base precisam ter baixos teores de fósforo, enxofre e nitrogênio (SCHMITT; IUNG, 2018). Além disso, durante o processo de produção realizado à altas temperaturas, a oxidação é favorecida pela presença de manganês e, para diminuir tal efeito, silício pode ser adicionado (GONG; COOMAN, 2011). As tendências industriais para aços alto Mn de aplicações automobilísticas é aumentar a resistência de aços alto Mn austeníticos, limitando a quantidade de Mn a 12%p e ajustando o teor de C entre 0,4 e 0,9%p (SCHMITT; IUNG, 2018).

Atualmente, os trabalhos publicados vão desde estudos de microsegregação (SHEN *et al.*, 2020) e corrosão sob tensão (OLUGBADE, 2020) à ultrarefino de grão austenítico (HUNG *et al.*, 2020), como mostrado na Figura 2.

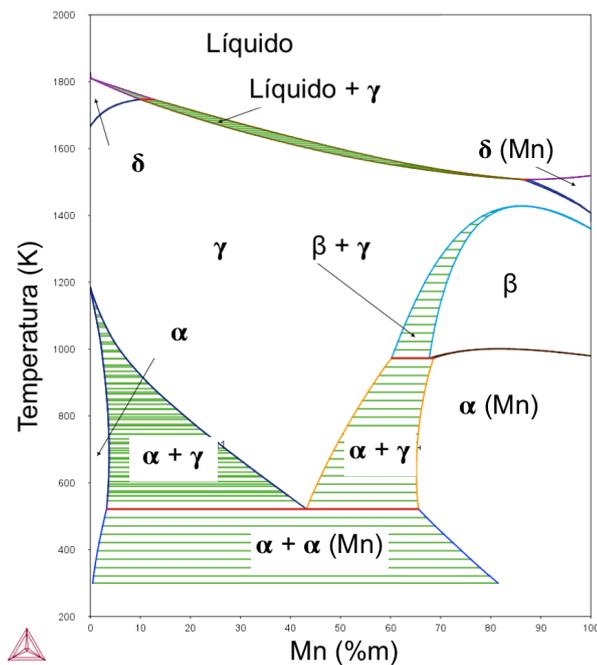
Figura 2 – Imagens de MET mostrando o ultrarefino de grão austenítico em aço : a) Tamanho de grão próximo a  $2 \mu\text{m}$  e b) Macla de 1nm de espessura em um grão de  $1,4 \mu\text{m}$



Fonte: Hung *et al.* (2020)

Esses altos teores de Mn tornam o diagrama de fases Fe-Mn (Figura 3) um bom início para a compreensão dessas ligas.

Figura 3 – Diagrama Fe-Mn

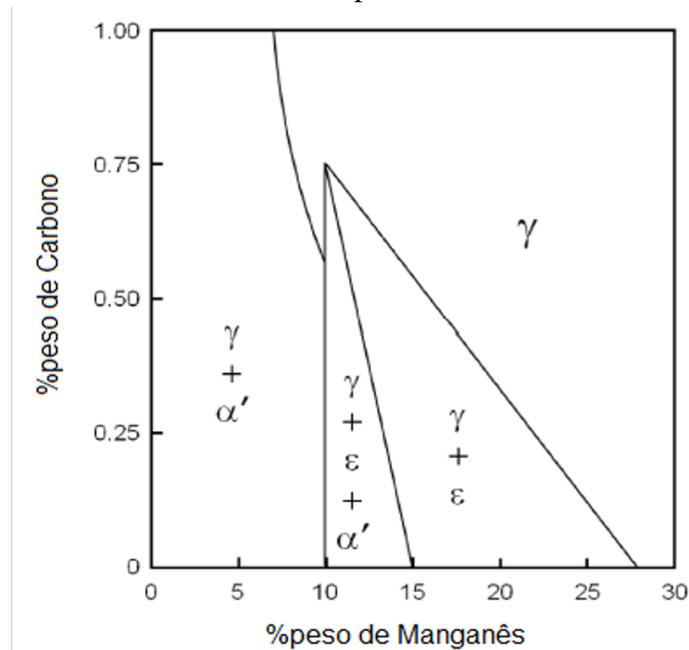


Fonte: autoria própria

É possível notar que existe a formação de ferrita  $\delta$  a altas temperaturas para valores até aproximadamente 13% e, novamente, a partir de aproximadamente 86% de Mn. Para valores intermediários entre os descritos, a liga se solidifica inteiramente com fase austenítica.

Como proposto por Schumann (1972), em relação a condições de resfriamento em estados fora do equilíbrio, no sistema Fe-Mn-C pode-se encontrar dois produtos metaestáveis (Figura 4): martensita  $\alpha'$ , CCC ou TCC, e martensita  $\varepsilon$ , que possui estrutura cristalina HC.

Figura 4 – Diagrama de fases metaestáveis para o sistema Fe-Mn-C



Fonte: Schumann (1972)

Além disso, as martensitas formadas nesses materiais podem ser atérmicas ou isotérmicas, dependentes da temperatura (DAFé *et al.*, 2013; SAHU *et al.*, 2007; HAMADA *et al.*, 2008). Durante estudo de um aço com 1,07% C, Averbach *et al.* (1948) observaram uma decomposição lenta da austenita e formação de martensita em temperaturas próximas à 0°C. A proposta de Averbach *et al.* (1948) foi que a martensita formada era isotérmica, como consequência de um efeito residual da reação de endurecimento desses aços.

Segundo Borgenstam *et al.* (1995) pode-se definir uma temperatura  $M_g$  acima da temperatura  $M_i$  na qual pode existir uma nucleação da fase mas não um crescimento. Assim, não se pode descartar a formação de martensita isotérmica em temperaturas acima de  $M_i$  na presença de algum mecanismo de nucleação eficaz. As martensitas atérmicas são aquelas formadas apenas quando a temperatura  $M_i$  é alcançada.

Sahu *et al.* (2007) em um estudo com aço Fe-26Mn-0,14C (%m) mostrou que uma

taxa menor de resfriamento permite um tempo maior para nucleação de martensitas isotérmicas. Enquanto taxas de resfriamento maiores as suprimem e aumentam a probabilidade de formação de martensitas atérmicas. Dafé *et al.* (2013) em seu estudo com diferentes taxas de resfriamento (ao forno, ao ar e na água) de amostra de aço Fe-17Mn-0,006C (%m), encontrou que o volume de martensita  $\varepsilon$  foi maior em taxas de resfriamento mais lentas, levando à conclusão de que a martensita  $\varepsilon$  formada era do tipo isotérmica. Para a martensita  $\alpha'$ , maiores taxas de resfriamento resultaram em maior fração volumétrica dessa fase e a conclusão foi que essa martensita foi do tipo atérmica.

No estudo de Sahu *et al.* (2007), os resultados mostram uma variação dos parâmetros de rede com as diferentes taxas de resfriamento. No caso da austenita, o aumento do parâmetro de rede ocorreu com o aumento da taxa de resfriamento. Em contrapartida, o parâmetro de rede da martensita  $\varepsilon$  diminuiu com o aumento da taxa de resfriamento e, também, aumento da fração dessa fase.

Uma importante conclusão de Sahu *et al.* (2007) é que com o progresso da transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$ , novas camadas de martensita  $\varepsilon$  vão sendo criadas e a austenita adjacente é submetida à tração na rede para manter o volume macroscópico da amostra. O cristal de austenita aumenta de parâmetro de rede devido às mudanças na rede desenvolvidas pela formação e crescimento de martensita  $\varepsilon$ .

Muitas propriedades dos aços com altos teores de Mn podem ser explicadas em relação ao seu mecanismo de aumento de plasticidade. Por exemplo, em 1984 foi evidenciada as primeiras aplicações desses aços em temperaturas criogênicas (CHARLES; LUTTS, 1984) e posteriormente descobriu-se que o mecanismo de resistência era um fator decisivo para essa propriedade.

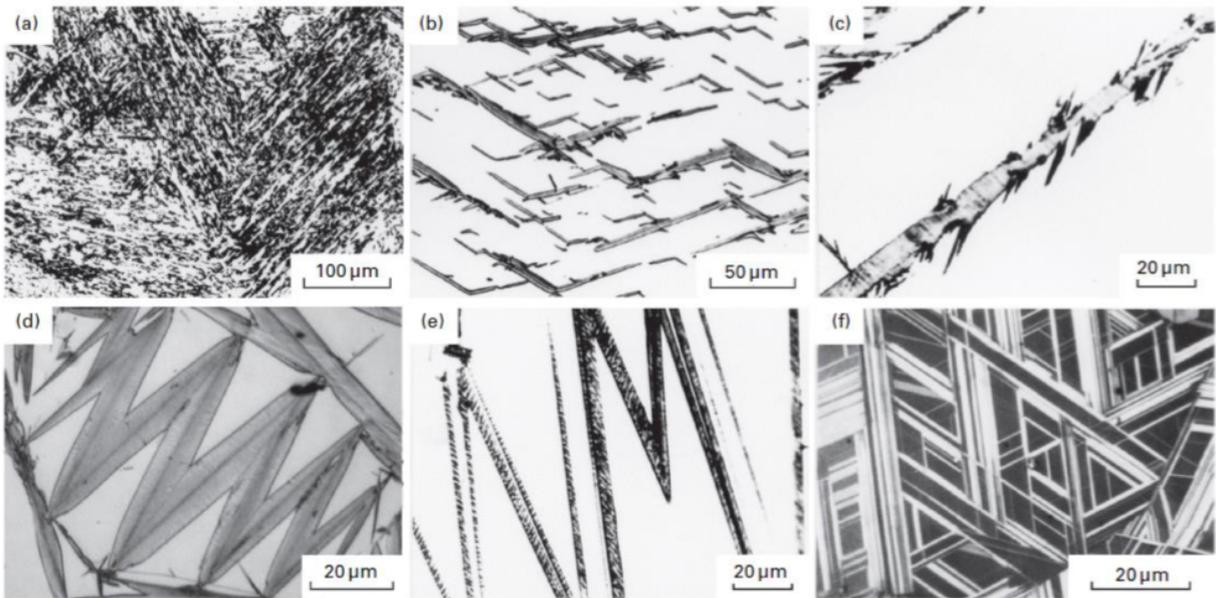
### **3.1.1 Mecanismos de Aumento de Resistência em Aços Alto Mn**

Os aços com elevados teores de Mn podem ser classificados segundo seu mecanismo de resistência como aços de *transformation induced plasticity* / plasticidade induzida por deformação (TRIP) e aços de *twining induced plasticity* / plasticidade induzida por maclação (TWIP).

Os aços TWIP possuem aumento de plasticidade devido a formação de maclas, quando submetidos a deformação. Nos aços TRIP o efeito é devido a formação de fases martensíticas por transformações de fases do tipo  $\gamma \rightarrow \alpha'$  e/ou  $\gamma \rightarrow \varepsilon$ . A martensita  $\alpha'$  é comum

em diversos tipos de aços, inclusive aços Fe-Ni e Fe-C, já a martensita  $\epsilon$  é formada apenas em aços com baixa energia de falha empilhamento, com aços Fe-Cr-Ni e ligas com alto teor de Mn (MAKI, 1990). A microestrutura dessas martensitas, dependendo do teor de elementos pode ser de diferentes formas, como mostrado na Figura 5.

Figura 5 – Micrografias óticas de vários tipos de martensitas em ligas ferrosas. (a) ripa de  $\alpha'$  (Fe-7%Ni-0,22%C), (b)  $\alpha'$  butterfly (Fe-20%Ni-0,73%C), (c)  $\alpha'$  em placa (225) $\gamma$  (Fe-8%Cr-0,9%C), (d)  $\alpha'$  lenticular (Fe-29%Ni- 0,26%C), (e)  $\alpha'$  em placa fina (Fe-31%Ni-0,23%C), (f) martensita  $\epsilon$  (Fe-24%Mn).

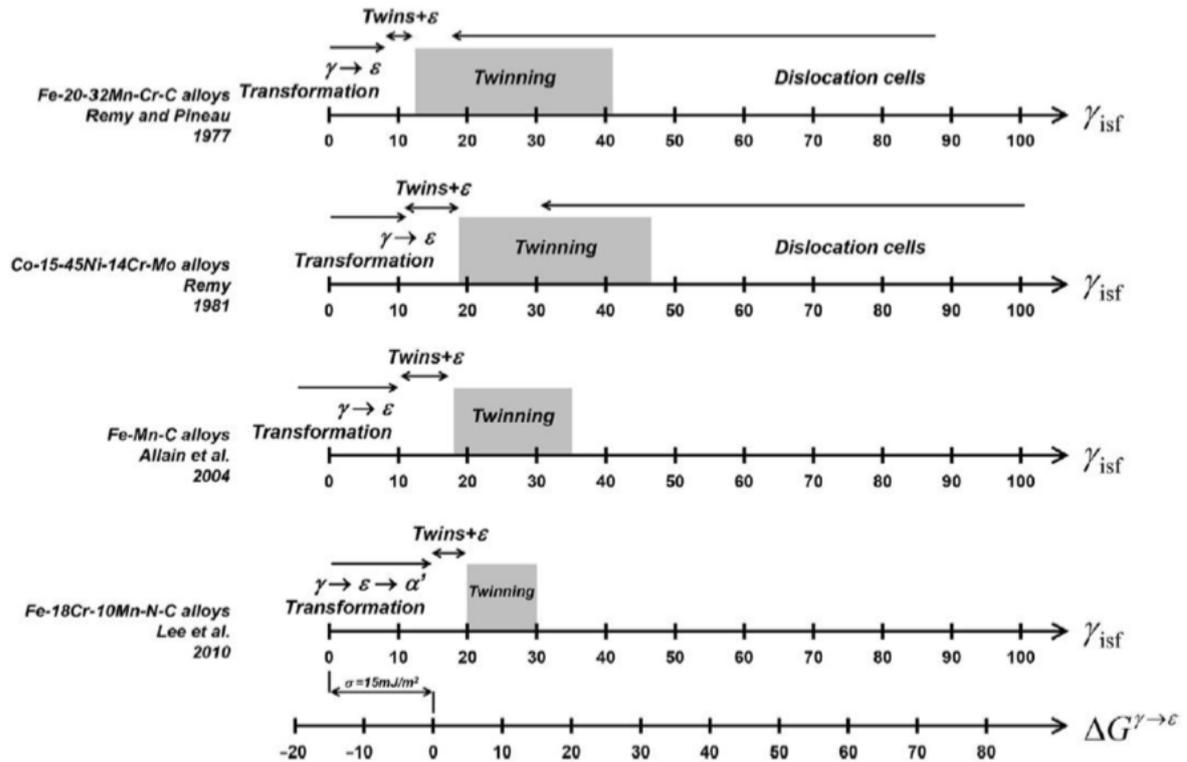


Fonte: Maki (1990)

A martensita  $\alpha'$  e a martensita  $\epsilon$  aumentam a resistência do material devido aos contornos de fases gerados dentro do grão austenítico. Além disso, com o aumento do teor de carbono, a dureza dessas fases também aumenta. A formação dessas duas fases martensíticas pode ocorrer tanto diretamente da transformação da austenita ( $\gamma \rightarrow \alpha'$  e/ou  $\gamma \rightarrow \epsilon$ ) quanto pode ocorrer de forma indireta pela transformação  $\gamma \rightarrow \epsilon \rightarrow \alpha'$ , com a transformação da fase  $\alpha'$  a partir da fase  $\epsilon$  (BRACKE *et al.*, 2007).

Esses dois mecanismos de aumento de resistência estão intrinsecamente conectados com a energia de falha de empilhamento (EFE), que governa o custo energético para criar tal defeito (BOUAZIZ *et al.*, 2011; BYUN *et al.*, 2004; KARAMAN *et al.*, 2000). O cálculo da EFE é um parâmetro importante para determinar se maclação, transformação martensítica ou simplesmente o deslizamento de discordâncias ocorrerão durante a deformação do material (CURTZE; KUOKKALA, 2010), como exemplificado na Figura 6.

Figura 6 – Faixas de EFE para transformação, maclação por deformação e deslizamento de discordâncias em ligas ferrosas CFC para liga de Fe-(20-32)%Mn-Cr-C (em % p.), ligas de Co-(15-45)%Ni-14Cr-Mo (em % p.), aços TWIP e aço Fe-18%Cr-10%Ni-C-N..



Fonte: Rémy (1981)

Acredita-se que a EFE da austenita mãe tem uma relação direta com as reações de formação de martensita (BEHJATI; NAJAFIZADEH, 2011; MCGRATH *et al.*, 2013; SATO *et al.*, 1989). Para aços com mais baixa EFE ( $< 20 \text{ mJ/m}^2$ ) a reação  $\gamma \rightarrow \epsilon \rightarrow \alpha'$  é mais favorável enquanto que aços com alta EFE ( $> 20 \text{ mJ/m}^2$ ) a reação direta  $\gamma \rightarrow \alpha'$  pode ser encontrada.

Esses mecanismos de aumento de resistência, causados ou por maclação ou por transformação de fases, influenciam nas propriedades do material. Para melhor compreensão dessas transformações de fases ou do processo de maclação, é necessário compreender o mecanismo de escorregamento da fase mãe em aços alto Mn, a austenita.

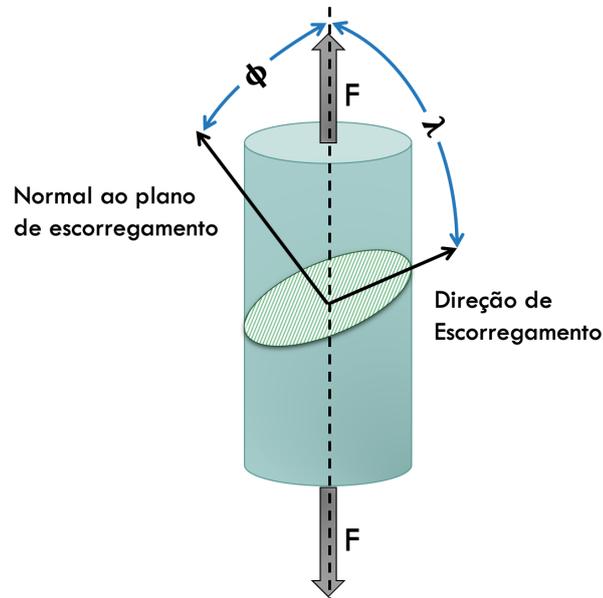
### 3.2 Escorregamento em Cristais CFC

Os planos e direções de escorregamento são aqueles em que preferencialmente ocorre o deslizamento em um cristal e possuem propriedades cristalográficas intrínsecas. De forma geral, os planos e direções de escorregamento são aqueles que possuem as mais altas densidades planares e lineares, respectivamente. Em cristais hexagonais, o deslizamento ocorre

com frequência no plano basal,  $\{0001\}$ , em direções  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ . Em cristais CCC, ocorre em direções  $\langle 111 \rangle$  com planos não totalmente definidos em escala macroscópica, e para cristais CFC o deslizamento ocorre nos planos  $\{111\}$  nas direções  $\langle 110 \rangle$ . Cristais CFC possuem quatro planos  $\{111\}$  com três direções  $\langle 110 \rangle$  e, portanto, possuem doze sistemas de escorregamento do tipo  $\{111\}\langle 110 \rangle$  (HULL; BACON, 2011).

Para o escorregamento acontecer, é necessário um cisalhamento na rede cristalina (Figura 7). Como consequência desse cisalhamento, a superfície do cristal fica na forma de degraus. Além disso, é possível relacionar a tensão normal macroscópica aplicada ( $\sigma = \frac{F}{A}$ ) com a tensão necessária para o cisalhamento ( $\tau$ ) pela equação 3.2.

Figura 7 – Esquemático de escorregamento em um cristal



Fonte: Autoria própria

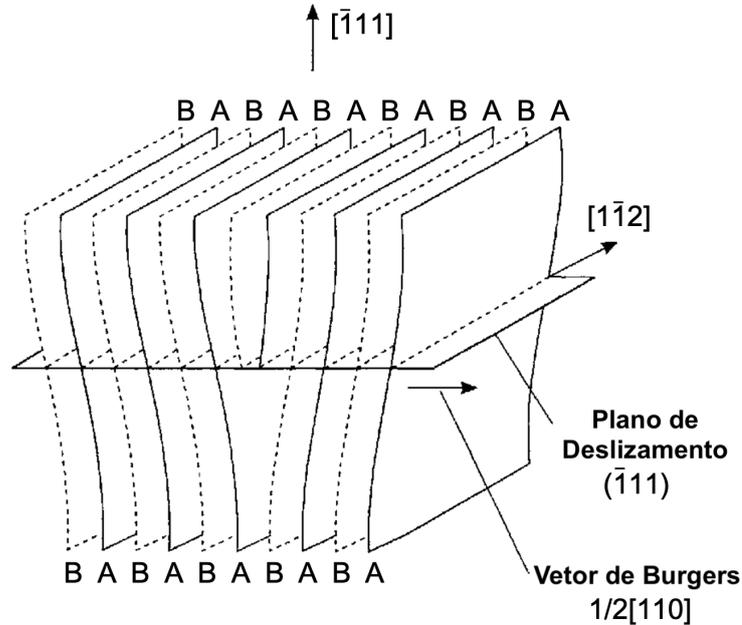
$$\tau = \frac{F}{A} \cdot \cos \phi \cdot \cos \lambda \quad (3.2)$$

Onde  $\cos \phi \cdot \cos \lambda$  formam o chamado fator de Schmid.

Além disso, para o escorregamento acontecer é necessário que discordâncias se movimentem nesses planos e direções de alta densidade. Em cristais CFC, como a austenita nos aços, não necessariamente os semi-planos extras  $\{110\}$  que formam as discordâncias perfeitas estão imediatamente adjacentes (Figura 8). Se estiverem separadas, a discordância perfeita formará duas discordâncias parciais (HULL; BACON, 2011). Dentre elas, as mais comuns nesses cristais são as parciais de Shockley e as parciais de Frank. As primeiras estão mais

associadas ao escorregamento de cristais CFC. Os vetores de Burgers relacionados às parciais de Shockley estão mostrados na equação 3.3.

Figura 8 – Única discordância em aresta  $\frac{1}{2} \cdot [110]$  em cristal cúbico de face centrada



Fonte: adaptado de Hull e Bacon (2011)

$$\frac{1}{2} \cdot \langle 110 \rangle = \frac{1}{6} \cdot \langle 211 \rangle + \frac{1}{6} \cdot \langle 12\bar{1} \rangle \quad (3.3)$$

Para cada um dos quatro planos  $\{111\}$  existem três direções  $\langle 110 \rangle$  e três direções  $\langle 112 \rangle$ . Para o plano (111), isso pode ser visto na equação 3.4.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot [\bar{1}10] &= \frac{1}{6} \cdot [\bar{2}11] + \frac{1}{6} \cdot [\bar{1}2\bar{1}] \\ \frac{1}{2} \cdot [\bar{1}01] &= \frac{1}{6} \cdot [\bar{2}11] + \frac{1}{6} \cdot [\bar{1}\bar{1}2] \\ \frac{1}{2} \cdot [0\bar{1}1] &= \frac{1}{6} \cdot [1\bar{2}1] + \frac{1}{6} \cdot [\bar{1}\bar{1}2] \end{aligned} \quad (3.4)$$

De forma geométrica, podemos ver todas as discordâncias principais e parciais de Shockley no tetraedro de Thompson para este sistema de escorregamento (Figura 9). O tetraedro de Thompson é uma forma geométrica mais simples e conveniente de descrever todas as discordâncias totais e parciais presentes no cristal. Para isso, os quatro planos  $\{111\}$  estão mostrados dentro do cristal cúbico, formando um tetraedro ABCD, e são representados de forma



que conhecemos (Tabela 1).

Tabela 1 – A temperatura inicial de transformação martensítica e sua respectiva dureza Vickers para martensita formadas em diversos materiais

Composição	Mi (K)	Dureza (HV)
ZrO <sub>2</sub>	1200	1000
Fe-31Ni-0,23C	83	300
Fe-34Ni-0,22C	<4	250
Fe-3Mn-2Si-0,4C	493	600
Cu-15Al	253	200

Fonte: adaptado de Bhadeshia (2006)

Como mostrado na Tabela 1, a fase martensítica pode se formar em diversos materiais, além do aço. Podem ter sua temperatura de início de transformação tão alta quanto 1200 K para ZrO<sub>2</sub> ou tão baixa que ocorra abaixo de 4 K para a liga de Fe-34Ni-0.22C.

Outro erro comum é acreditar que a martensita formada terá dureza elevada, o que pode, dependendo do material, ser uma afirmação falsa ou verdadeira. Geralmente, para materiais que possuem um teor de carbono considerável em sua composição, a martensita terá dureza elevada, como para a liga de Fe-3Mn-2Si-0.4C que possui dureza de 600 HV. Para os que não possuem esse elemento, a martensita terá dureza baixa, como, por exemplo, a liga de Cu-15Al que possui dureza de 200 HV.

Muitos estudos tentaram compreender e formular como ocorre a transformação martensítica de forma geral. Esses estudos estão resumidos nas próximas seções.

### 3.3.1 *Relações de Orientação*

As relações de orientação são encontradas em uma transformação de fases, deformação ou em experimentos de recristalização e, geralmente, não são randômicas. Este fato indica que existem relações de orientação principais que reduzem a energia de interface e, consequentemente, a energia de ativação para nucleação. Portanto, os núcleos orientados dessa forma teriam mais facilidade de crescer.

Nas transformações de fase, a deformação deve ser do tipo que minimiza a energia de deformação da rede. De todas as deformações possíveis, apenas algumas podem satisfazer este critério de energia de deformação mínima. Novamente, isso levaria a uma relação de orientação não aleatória observada.

A transformação da fase martensítica ocorre de forma adifusional e, portanto, existem

relações de orientação cristalográfica entre autenita-mãe e martensita. Existem orientações bem conhecidas pela comunidade acadêmica sobre transformação martensítica.

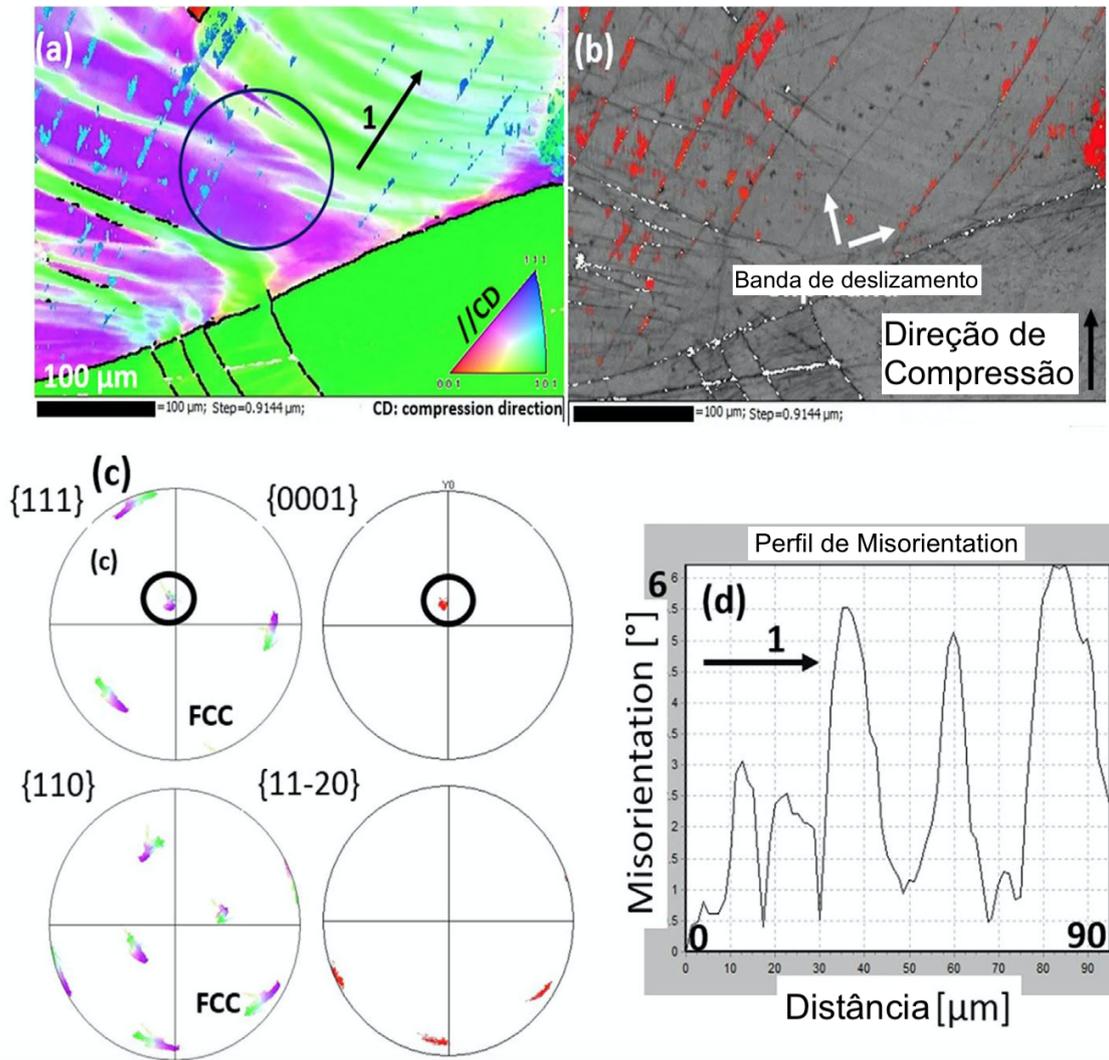
A martensita  $\varepsilon$  é o produto da transformação de fases da austenita, com cristal CFC, em um cristal hexagonal. Essas duas fases se diferenciam a partir de um plano de empacotamento (LECROISEY; PINEAU, 1972) e, de acordo com a relação de orientação de Shoji-Nishiyama (S-N), os planos  $(111)_\gamma$  são paralelos aos planos  $(0001)_\varepsilon$ . As variantes da martensita  $\varepsilon$  são formadas em diferentes planos  $\{111\}_\gamma$  e possuem uma relação de rotação de eixo de  $70.53^\circ$  no  $\langle 101 \rangle // \langle 11\bar{2}0 \rangle$ , como descrita pela equação 3.5. No caso da martensita  $\varepsilon$  formada em torno de maclas de recozimento da fase  $\gamma$ , a orientação ideal angular deve estar em torno de  $38.94^\circ$  no eixo  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  (TASAKI *et al.*, 2019).

$$\begin{aligned} & \{111\}_\gamma || \{001\}_\varepsilon \\ & \langle 101 \rangle_\gamma || \langle 11\bar{2}0 \rangle_\varepsilon \end{aligned} \tag{3.5}$$

As relações de orientação podem ser visualizadas nas figuras de polos referentes às respectivas fases. A Figura 10 mostra um mapa de orientação da austenita (Figura 10a) e da martensita  $\varepsilon$  (Figura 10b), assim como as figuras de polos correspondentes à relação Shoji-Nishiyama (Figura 10c). A figura de polos  $(111)$  da austenita tem um ponto em comum com a figura de polos  $(0001)$  da martensita. Além disso, os pontos ligeiramente deformados na figura de polos da austenita sugerem uma intensa deformação por escorregamento nos grãos austeníticos.

O perfil de misorientation mostrado na Figura 10d pode ser descrito como um ângulo na qual a rede é rotacionada em torno de um eixo comum em relação ao primeiro ponto (RANDLE, 2001). O perfil de misorientation da austenita (linha 1 na Figura 10a e Figura 10d) segundo Eskandari *et al.* (2018b) representa um perfil seno-cosseno.

Figura 10 – Análise de EBSD para uma amostra deformada a 900°C: a) mapa de orientação da austenita, b) mapa de orientação da martensita  $\epsilon$  com austenita em cinza, c) análise da figura de polos da austenita e martensita e d) perfil de misorientation paralelo à direção marcada



Fonte: adaptado de Eskandari *et al.* (2018b)

As relações de orientação entre austenita e martensita  $\alpha'$  (CCC) podem ser de Bain, Kurdjumov-Sachs (KURDJUMOW; SACHS, 1930), Nishiyama-Wasserman (NISHIYAMA, 1934) e Greninger-Troiano (G-T). Essas relações estão descritas na Tabela 2. Para atender às condições de paralelismo mostradas pelas relações de orientação, existem algumas possibilidades de arranjo entre os dois cristais das fases mãe e produto que são chamadas de variantes.

As relações de orientação também possuem correspondência com a morfologia das martensitas formadas. Como mostrado na Figura 5, a martensita  $\alpha'$  pode existir em ligas ferrosas em diversas morfologias: placa, borboleta, lenticular e placa fina. Dentre estas, a morfologia de placas é a mais comum em aços comerciais.

Tabela 2 – Principais relações de orientação entre CFC e CCC

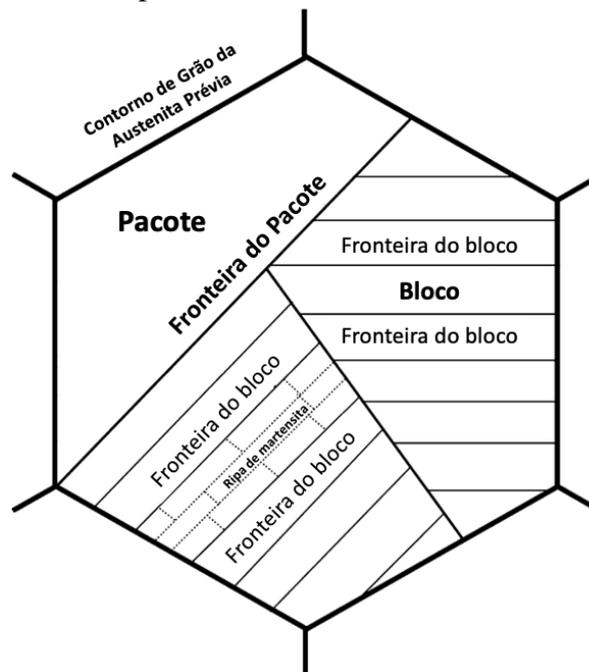
Relação de Orientação	Correspondência	Número Total de Variantes
Bain	$\{001\}_{\gamma} \parallel \{001\}_{\alpha}$ $\langle 100 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 110 \rangle_{\alpha}$	3
K-S	$\{111\}_{\gamma} \parallel \{011\}_{\alpha}$ $\langle 011 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 111 \rangle_{\alpha}$	24
N-W	$\{111\}_{\gamma} \parallel \{011\}_{\alpha}$ $\langle 112 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 011 \rangle_{\alpha}$	12
G-T	$\{111\}_{\gamma} \parallel \{110\}_{\alpha}$ $\langle 123 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 011 \rangle_{\alpha}$	12

Fonte: adaptado de Butrón-Guillén *et al.* (1997)

Esta morfologia pode ainda, ser subdividida em outras classificações de acordo com a escala proposta (Figura 11). Segundo Morito *et al.* (2006), em uma escala mais grosseira, o grão de austenita se divide em diversos pacotes, cada um contendo blocos paralelos. Cada bloco é subdividido em ripas estreitas, com largura de ordem submicrométrica.

Em termos cristalográficos, os pacotes são o grupo de ripas com mesmo plano de hábito enquanto os blocos são o grupo de ripas com a mesma orientação cristalográfica (MORITO *et al.*, 2003). Além disso, segundo Morito *et al.* (2003) em um certo pacote, as ripas possuem a mesma relação de planos paralelos entre planos empacotados.

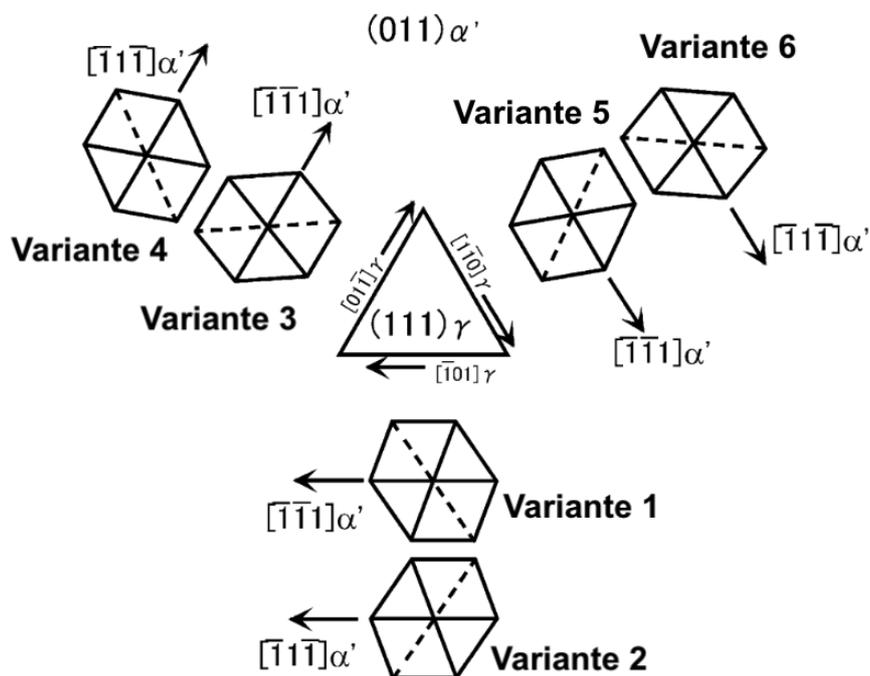
Figura 11 – Hierarquia da microestrutura de uma martensita em placas



Fonte: adaptado de Kitahara *et al.* (2006)

Considerando a orientação K-S apresentada, existem 24 variantes possíveis. Então, de acordo com a morfologia da martensita, podem existir até quatro diferentes pacotes cristalográficos em um grão de austenita. Dentro do pacote, existe a possibilidade de seis diferentes variantes existirem com diferentes relações de paralelismo entre direções, mas com a mesma relação de paralelismo entre planos empacotados (MORITO *et al.*, 2003). A Figura 12 mostra as possíveis variantes formadas dentro de um único pacote.

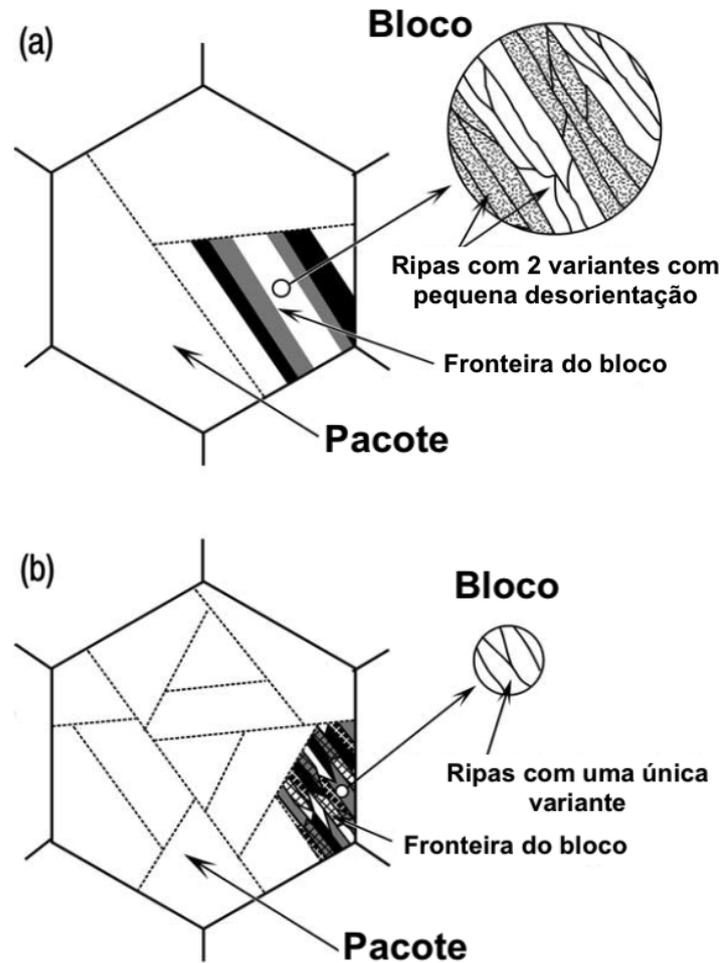
Figura 12 – Esquemático das orientações das variantes K-S em um pacote de martensita



Fonte: adaptado de Morito *et al.* (2003)

Além disso, o teor de carbono presente na liga também influencia a morfologia da martensita. Morito *et al.* (2003) em seu estudo de ligas Fe-C, encontrou que o aumento do teor de carbono (0,0026% para 0,61%) diminui o tamanho dos blocos e pacotes. Para ligas de baixo carbono, os pacotes são maiores e mais desenvolvidos e os blocos podem ser constituídos de grupos de variantes. Para ligas de alto carbono, os pacotes são mais finos e os blocos são constituídos de uma única variante, como mostrado na Figura 13.

Figura 13 – Esquemático da morfologia da martensita para uma liga Fe-C com a) baixo carbono (0-0,4% C) e b) alto carbono (0,6% C)



Fonte: adaptado de Morito *et al.* (2003)

Alguns estudos já mostraram inconsistências entre as relações de orientação  $\gamma$ - $\alpha'$  teóricas e os dados experimentais. Em relação a isso, estudos anteriores (NOLZE, 2004) provaram que a relação entre essas fases é irracional.

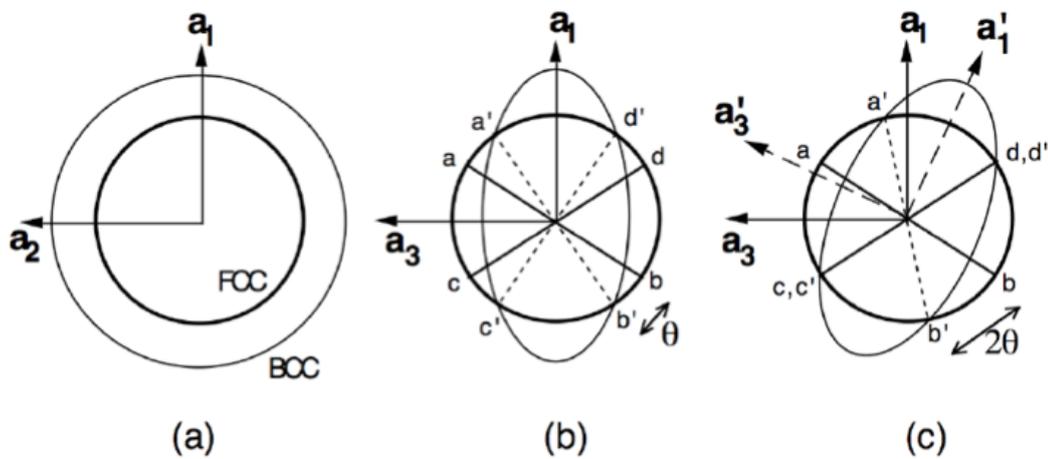
Não existe uma descrição de linha invariante nas teorias de relação de orientação, ou seja, não existe a formação de um plano de hábito na transformação de fases. Portanto, essas teorias como única forma de descrever as transformações martensíticas estão incompletas.

De acordo com Bhadeshia (1987), existe uma maneira simples para explicar o porquê que apenas uma deformação de Bain não consegue descrever uma linha invariante. Na Figura 14 pode-se notar que a deformação de Bain associada com uma rotação de corpo rígido pode descrever esse fenômeno.

Considerando os cristais de austenita e de martensita como volumes esféricos (Figura 14a), apenas a deformação de Bain transforma o cristal de austenita em uma elipsoide (Figura

14b). Existem linhas sem distorção após a deformação aplicada ( $a'b'$  e  $c'd'$ ) comparada com a anterior à deformação ( $ab$  e  $cd$ ). Entretanto, elas estão rotacionadas entre si. Após uma rotação de corpo rígido (Figura 14c), as linhas se coincidem e são sem rotação e sem distorção.

Figura 14 – Esquemático mostrando a) cristais de austenita e martensita como esferas, b) cristal de austenita após a deformação de Bain e c) formação de linha invariante após a combinação da deformação de Bain com rotação de corpo rígido.



Fonte: Bhadeshia (2006)

A deformação de Bain e a rotação de corpo rígido podem ser descritas matematicamente como matrizes quadradas de ordem três. Portanto, representando a deformação de Bain como  $(FBF)$  e a rotação de corpo rígido como  $(FJF)$ , pode-se encontrar a deformação de transformação (do inglês, transformation strain)  $(FSF)$  pela equação 3.6.

$$(FSF) = (FBF) \cdot (FJF) \quad (3.6)$$

Entretanto, a deformação de Bain associada à uma rotação de corpo rígido não descreve, por exemplo, o porquê das relações de orientação serem irracionais. Para isto, existe uma teoria mais complexa.

### 3.3.2 A Teoria Fenomenológica da Transformação Martensítica

A principal característica da transformação de fase da martensita é a deformação, que em escala macroscópica tem as características de uma deformação de plano invariante. A deformação de volume (do inglês, shape deformation), representada pela matriz  $(FPF)$ , pode ser

fatorada (equação 3.7) em termos de sua magnitude "m", um vetor de deslocamento unitário  $\mathbf{d}$  e a normal unitária  $\mathbf{p}$ , também conhecida como plano de hábito.

$$(FPF) = I + m[F; d](p; F) \quad (3.7)$$

Para a reação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$ , a deformação de transformação é a mesma que a deformação de volume (FPF). Mas esse não é o caso para a transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$ . Entretanto, a deformação (FPF) que acontece na martensita CCC é experimentalmente uma deformação de plano invariante.

Combinando a deformação de Bain, representada pela matriz (FBF), com uma rotação de corpo rígido, representada pela matriz (FJF), o resultado é uma deformação de linha invariante. Matematicamente, a deformação de linha invariante pode ser fatorada em duas deformações de plano invariante. Se considerarmos duas deformações de plano invariante homogêneas, (FQF) e (FPF), teremos a equação 3.8.

$$(FSF) = (FPF)(FQF) \quad (3.8)$$

Da equação 3.6, temos:

$$(FSF) = (FBF)(FJF) \quad (3.9)$$

Então, comparando a equação 3.8 com a equação 3.9:

$$(FSF) = (FPF)(FQF) = (FBF)(FJF) \quad (3.10)$$

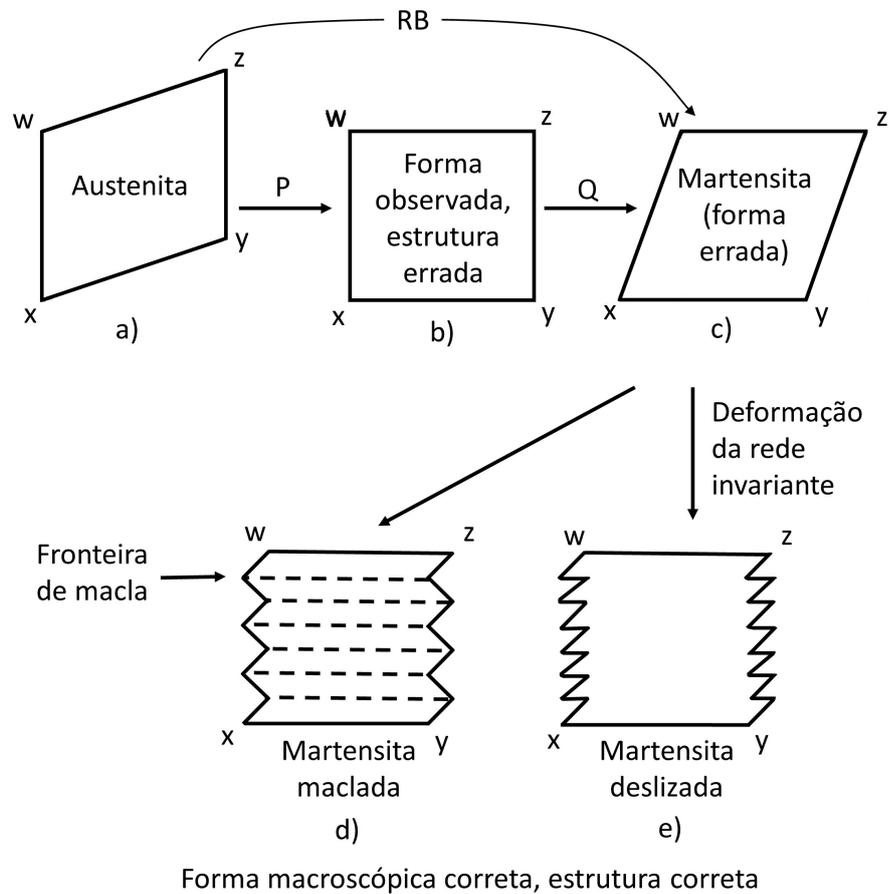
Isolando (FPF), teremos a equação 3.11:

$$(FPF) = (FBF)(FJF)(FQF)^{-1} \quad (3.11)$$

Para que a transformação martensítica ocorra com a formação de um plano invariante, a partir da equação 3.11, pode-se perceber que será necessária uma deformação de Bain seguida de uma rotação de corpo rígido e outra deformação de plano invariante.

Agora, vamos analisar o que cada uma dessas deformações causa na estrutura dos cristais e na transformação martensítica em si. A Figura 15 resume esses fenômenos e resulta na transformação completa da austenita em martensita.

Figura 15 – Ilustração esquemática da teoria fenomenológica da transformação martensítica: a) cristal de austenita, b) após uma deformação de plano invariante, c) após duas deformações de plano invariante, d) após maclagem e e) após deslizamento de planos



Fonte: adaptada de Bhadeshia (2006)

Na Figura 15a, tem-se o cristal de austenita mãe. Quando ocorre a transformação martensítica, é necessário a formação de um plano invariante. Aplicando essa deformação na estrutura da austenita (Figura 15b), o resultado é uma estrutura cristalográfica correta mas com forma errada.

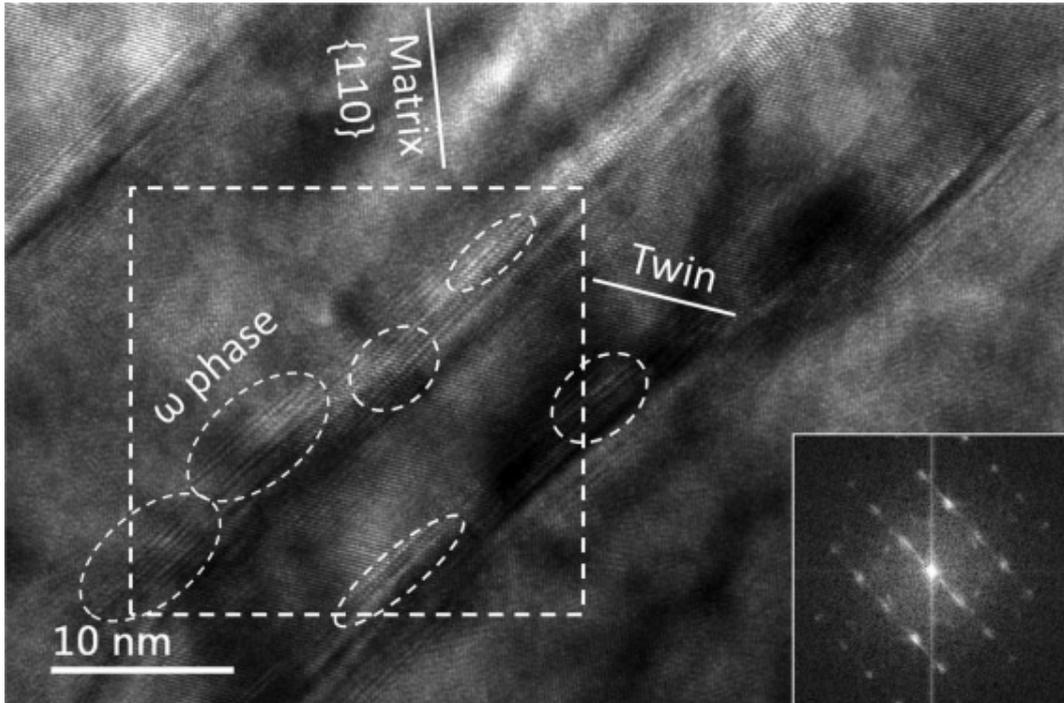
Aplicando uma outra deformação de plano invariante (Figura 15c), a interseção dessas duas deformações é uma linha invariante e o resultado é a martensita com uma forma errada. Como conseguiu-se a estrutura da martensita, é necessário agora uma deformação que não modifique a estrutura cristalográfica. Esta deformação pode ser conseguida através de maclas (Figura 15d) ou deslizamento de planos (Figura 15e).

Então, tudo está correto e a transformação martensítica pôde ser explicada cientificamente. Essa teoria é denominada de Teoria Fenomenológica da Transformação Martensítica (TFTM) e através dela pode-se notar o porquê:

- a. Da formação da linha invariante na transformação martensítica;

- b. Os planos de hábito são irracionais, já que são uma média dos planos de macla ou de deslizamento;
- c. Dentro de estruturas martensíticas podem-se encontrar maclas e discordâncias como subestruturas, como mostrado na Figura 16.

Figura 16 – Martensita com maclas formadas em sua subestrutura. Imagem de microscopia de transmissão de alta resolução



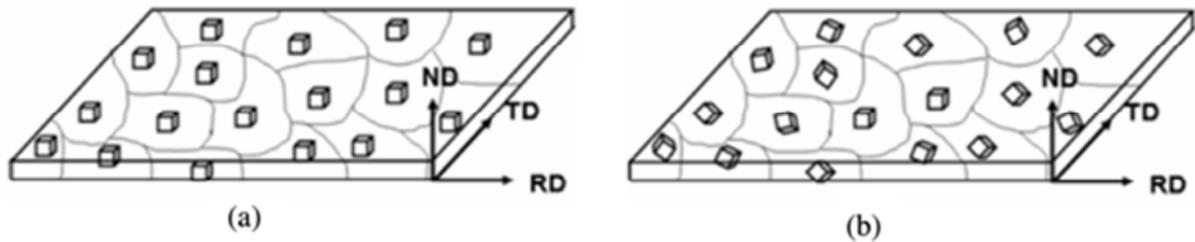
Fonte: Zhang *et al.* (2016)

### 3.4 Textura Cristalográfica e Seleção de Variantes

Materiais policristalinos são constituídos de vários cristais separados uns dos outros por fronteiras denominadas contornos de grão. A orientação de cada grão em relação aos eixos da amostra, na grande maioria dos materiais encontrados naturalmente, não é aleatória. Para este caso, existe, então, orientações cristalográficas preferenciais predominantes na amostra. Isso significa dizer que o material em questão possui textura cristalográfica. Para aqueles materiais em que a orientação dos grãos é aleatória, o material não possui textura. Um esquemático dessa representação pode ser visto na Figura 17.

As orientações cristalográficas comumente são representadas a partir de figuras de polos. Estas figuras são projeções estereográficas que mostram a distribuição de determinadas direções cristalográficas de determinados planos dos grãos que constituem o material.

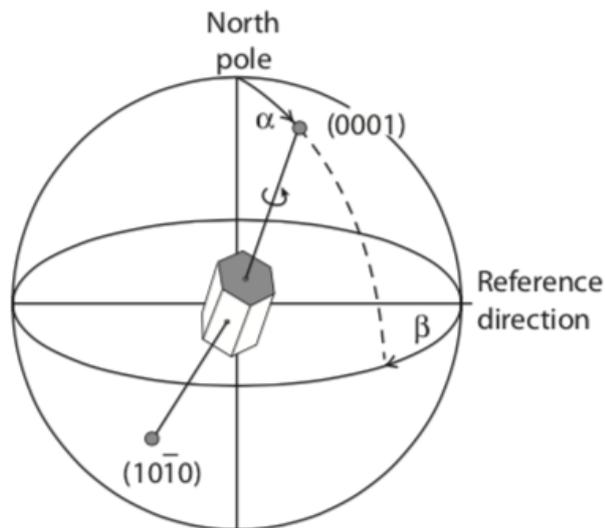
Figura 17 – Esquemático relacionando a orientação dos grãos com a textura dos materiais: a) material com textura e b) material sem textura



Fonte: Bunge (1982a)

A posição de um polo na projeção pode ser descrita em termos de dois ângulos (HANSEN *et al.*, 1978):  $\alpha$  descreve o polo azimutal, onde  $\alpha = 0$  é o polo norte da esfera, e  $\beta$  caracteriza a rotação em torno do eixo polar, como mostrado na Figura 18.

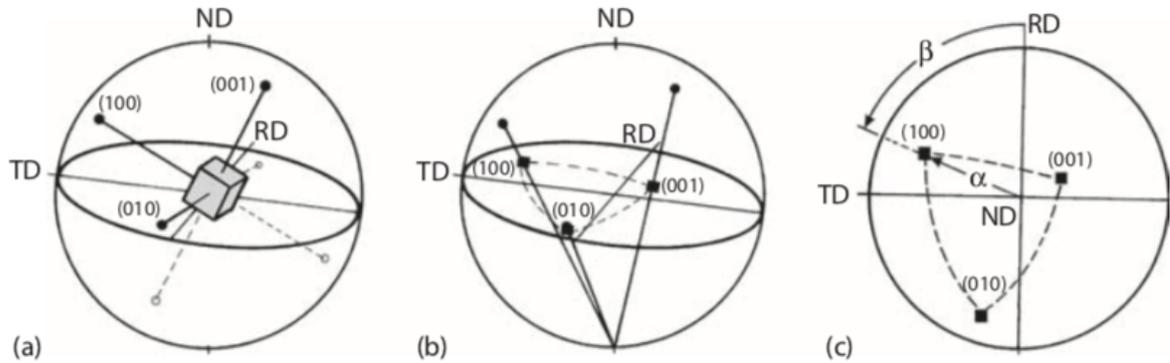
Figura 18 – Esquemático mostrando a orientação do plano basal (0001) de uma estrutura hexagonal



Fonte: Engler e Randle (2009)

Para representar direções cristalográficas, os eixos da amostra são comumente escolhidos como referência (Figura 19). Assim, por exemplo, para uma amostra laminada,  $\alpha = 0$  é escolhido para a *normal direction* / direção normal (*ND*) e  $\beta = 0$  é escolhido para a *rolling direction* / direção de laminação (*RD*) (BOWEN, 1990; BUNGE, 1982a).

Figura 19 – Representação dos polos  $\{100\}$  de um cristal cúbico em uma projeção estereográfica: a) Cristal em uma esfera, b) projeção dos polos  $\{100\}$  no plano equatorial e c) figura de polo  $\{100\}$  e a representação de  $\alpha$  e  $\beta$  para o plano  $\{100\}$



Fonte: Engler e Randle (2009)

Além das figuras de polos, pode-se representar textura cristalográfica pela *orientation distribution function* / função de distribuição de orientações cristalográficas (*FDOC*), sendo uma descrição mais completa da textura dos materiais. Através da *FDOC* são calculadas as densidades de probabilidades de se encontrar orientações  $\{hkl\}\langle uvw \rangle$  dos grãos da amostra em um espaço tridimensional. Para uma amostra sem textura, essa probabilidade deve ser igual à unidade.

Na *FDOC* a orientação do cristal é representado por três rotações consecutivas, que constituem os ângulos de Euler. Esses ângulos de Euler podem ser pensados como um conjunto mínimo de rotações para uma transformação de coordenadas entre cristal e amostra, ou seja, os ângulos de Euler descrevem a transformação do sistema de referência do cristal para a amostra ou vice-versa. As convenções mais utilizadas para descrever os ângulos de Euler são as definidas por Roe (1965), representada pelo conjunto de ângulo  $\{\Psi, \Theta, \Phi\}$  e Bunge (1982b), representada pelo conjunto  $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ . A equivalência entre essas duas notações está mostrada na equação 3.12.

$$\varphi_1 = \Psi + \frac{\pi}{2} \quad \Phi_{Bunge} = \Theta \quad \varphi_2 = \Phi_{Roe} - \frac{\pi}{2} \quad (3.12)$$

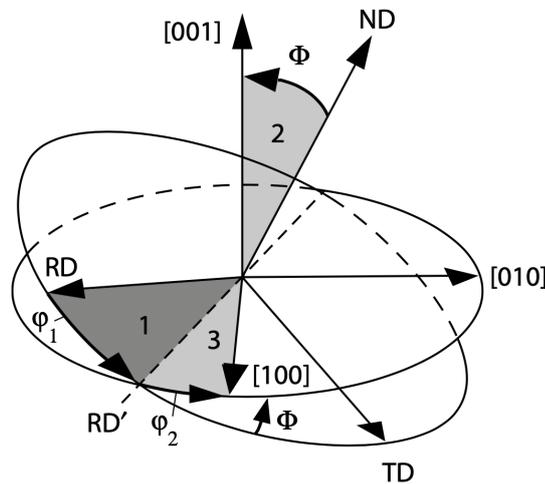
Neste estudo, seguiu-se a convenção de Bunge. A partir dessa convenção, as três rotações podem ser definidas como (ENGLER; RANDLE, 2009):

1.  $\varphi_1$  em torno da direção normal ND, o que transforma a *transverse direction* / direção transversal (*TD*) em *TD'* e a direção de laminação RD em *RD'*;

2.  $\Phi$  em torno do eixo RD' (nova orientação alcançada após a transformação causada por  $\varphi_1$ );
3.  $\varphi_2$  em torno de ND''(nova orientação alcançada após transformação causada por  $\varphi_1$ , seguida de  $\Phi$ )

Após essa transformação, as coordenadas da amostra (RD, TD e ND) coincidem com as coordenadas do cristal ([001], [010] e [100]), como mostrada na Figura 20. Esse conjunto de ângulos também pode ser representados matematicamente por uma matriz quadrada de ordem 3, que será especificada na seção 4.2.3 da metodologia.

Figura 20 – Esquemático mostrando as três rotações na convenção de Bunge a partir das quais as coordenadas da amostra coincidem com as coordenadas do cristal

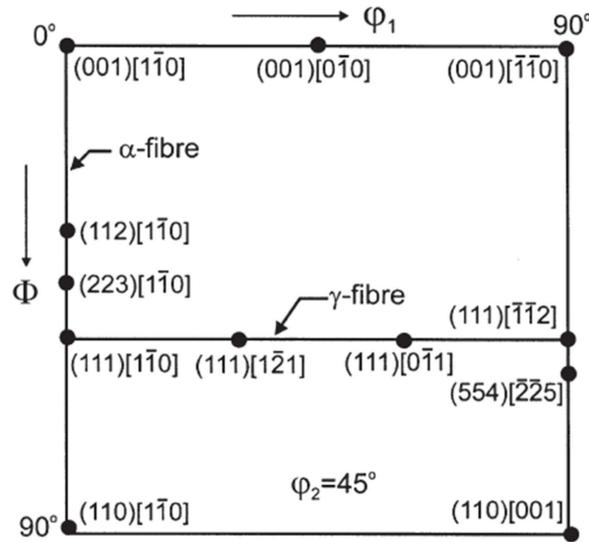


Fonte: Engler e Randle (2009)

Devido a simetria dos cristais, esses ângulos podem ser definidos em faixas menores que um círculo trigonométrico completo. Para o caso mais geral, o cristal triclinico, esses ângulos são definidos na faixa de  $0^\circ \leq \varphi_1, \varphi_2 \leq 360^\circ$  e  $0^\circ \leq \Phi \leq 180^\circ$ . Cristais com alguma simetria afetam a faixa angular de  $\varphi_1$ , por exemplo para cristais hexagonais  $0^\circ \leq \varphi_1 \leq 60^\circ$ .

As FDOC's podem ser calculadas a partir de figura de polos obtidas por difração de raios-X ou por EBSD. Ela é representada por seções de  $\varphi_2$  constante e pode ser comparada com ábacos (Figura 21). Para cristais cúbicos, em geral, utilizam-se seções de  $\varphi_2 = 45^\circ$  dos ábacos pois normalmente contém a maioria ou todas as orientações de interesse.

Figura 21 – Ábaco da seção de  $\varphi_2 = 45^\circ$  mostrando as posições das principais orientações.



Fonte: Humphreys e Hatherly (2004)

Alguns componentes de textura adquiriram nomes e símbolos, pela frequência em que são encontrados nos materiais. Para cristais CFC laminados, a Tabela 3 mostra essas principais componentes e seus ângulos de Euler. Considerando compressão uniaxial desses cristais, a textura pode ser descrita, de forma geral, como uma fibra  $\langle 110 \rangle$ , para cristais CFC com baixa EFE componentes  $\langle 111 \rangle$  também podem aparecer (HUMPHREYS; HATHERLY, 2004).

Tabela 3 – Componentes de textura em metais CFC laminados

Nome	Símbolo	Plano	Direção	$\varphi_1$ ( $^\circ$ )	$\Phi$ ( $^\circ$ )	$\varphi_2$ ( $^\circ$ )
Goss	G	{011}	$\langle 100 \rangle$	0	45	90
Brass	B	{011}	$\langle 211 \rangle$	35	45	90
S	S	{123}	$\langle 364 \rangle$	59	37	63
Cobre	C	{112}	$\langle 111 \rangle$	90	35	45
Cubo	-	{001}	$\langle 100 \rangle$	0	0	0
Cubo girado	-	{011}	$\langle 110 \rangle$	90	0	45

Fonte: adaptada de Humphreys e Hatherly (2004)

### 3.4.1 Seleção de Variantes

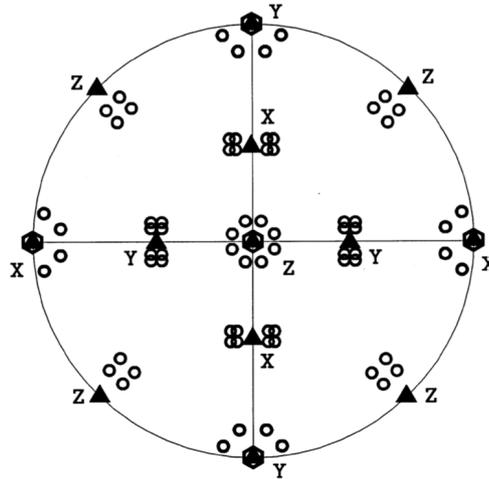
Discutido as convenções utilizadas para representar os cristais, suas texturas cristalográficas e as transformações de fases entre austenita e martensita, estamos aptos para compreender o conceito de seleção de variantes. Para as transformações de fases resultando nas martensitas  $\alpha'$  e  $\varepsilon$  existem sistemas de escorregamento preferenciais na austenita-mãe. Como visto nas seções anteriores, é necessário a formação de um plano de hábito para as transformações martensíticas

ocorrerem. Resgatando a equação 3.7, pode-se notar que a deformação de volume que governa essas transformações é definida por planos (**p**) e direções (**d**) cristalográficas preferenciais.

$$(FPF) = I + m[F;d](p;F) \quad (3.7)$$

Então, podem-se encontrar soluções cristalográficas que atendem à equação 3.7 e que estão relacionadas aos sistemas cristalinos. Para a transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$  podem existir até 24 variantes de martensita em cada grão, e orientação, de austenita (Figura 22). Já para a transformação  $\gamma \rightarrow \epsilon$ , podem existir até 12 variantes de martensita  $\epsilon$  para cada grão de austenita.

Figura 22 – Representação esquemática da orientação inicial da fase-mãe (hexágonos), variantes de Bain (triângulos) e variantes KS (círculos)



Fonte: Butrón-Guillén *et al.* (1997)

Entretanto, dependendo da orientação inicial do cristal da fase-mãe e do esforço que for aplicado, nem todas as variantes de martensita podem aparecer. Para esse fenômeno, dá-se o nome de seleção de variantes. Existem diversos modelos matemáticos para a previsão da seleção de variantes, que serão descritos a seguir.

1. Taylor-Bishop-Hill: Taylor (1938) se baseou em encontrar os sistemas de deslizamento em um cristal que podem produzir uma mudança de forma com o menor gasto de energia. Neste caso, não importa se existe um estado de tensão que poderia ativar fisicamente os sistemas de escorregamento. Bishop e Hill (1951) simplificaram o método de Taylor e sugeriram uma alternativa equivalente a este método. Nele o estado de tensão para provocar um incremento de deformação é aquele que maximiza a energia no material pela aplicação de tensão. Viana (2014) estudou este modelo aplicado na seleção de variantes

em aços Maraging 350, que apresentou bons resultados para amostras comprimidas abaixo do limite de escoamento e também em deformações plásticas com menores deformações.

2. Patel-Cohen: Neste modelo, Patel e Cohen (1953) calculam a energia de interação para a formação da martensita a partir da tensão macroscópica aplicada. Os ângulos entre a direção da tensão aplicada e o plano de hábito e o plano normal são diferentes para cada variante, assim, as energias calculadas também serão diferentes. Nesse modelo, energias positivas significam variantes selecionadas enquanto energias negativas significam variantes não selecionadas. Na seção 4.2.3 da metodologia, esse modelo será detalhado matematicamente.
3. Humbert: O modelo desenvolvido por Humbert *et al.* (2007) calcula a energia para cada variante seguindo os mesmos princípios de Patel e Cohen (1953). Neste modelo, a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  foi matematicamente descrita. Para o caso da martensita  $\alpha'$ , o modelo segue dois passos, considerando que essa martensita é formada a partir  $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ . As variantes de martensita  $\varepsilon$  selecionadas são aquelas com mais alta energia, considerando um fator de 10%. O modelo de dois passos foi abandonado para prever as variantes da martensita  $\alpha'$ , já que era mais trabalhoso e resultava em variantes iguais às consideradas na transformação  $\gamma \rightarrow \alpha$ , proposta por Patel-Cohen. Porém, este modelo pode ainda ser utilizado para prever as variantes da martensita  $\varepsilon$ .

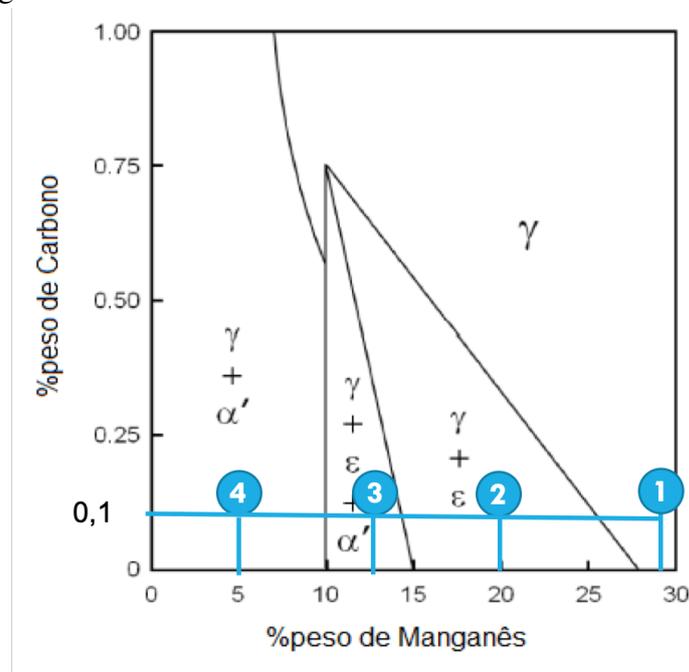
Outros modelos também são possíveis para a simulação da seleção de variantes. Os modelos aplicados nesta tese foram o Patel-Cohen para martensita  $\alpha'$  e Humbert para martensita  $\varepsilon$ . Kundu e Bhadeshia (2007) mostraram que esses dois modelos diferem por um fator de 0,5 J/mol na energia de interação e preveem as mesmas variantes para martensita  $\alpha'$ . Esses modelos estão descritos matematicamente na metodologia.

## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.1 Materiais

Os materiais como recebidos possuem composições químicas com alto teor de Mn, porém em diferentes proporções. A primeira etapa foi a escolha das composições a serem analisadas, de acordo com a possível formação de fases, através do gráfico de Schumann (1972). Foram escolhidas quatro composições distintas (Figura 23), com baixo teor de carbono, para serem analisadas diferentes transformações martensíticas e maclação. Portanto, diferentes martensitas ( $\alpha'$  e  $\epsilon$ ) são esperadas.

Figura 23 – Diagrama de Schumann modificado mostrando as faixas de composições escolhidas.



Fonte: Adaptado de (SCHUMANN, 1972)

A composição química dos materiais está mostrada na Tabela 4. Os materiais foram fabricados e doados em barras fundidas pela Fundação de Aço Inox (FAI).

Os materiais recebidos tiveram baixo teor de carbono, com alterações entre 0,15 e 0,20 %pC. Além disso, as porcentagens de Mn foram alteradas entre, aproximadamente, 5 %p Mn à 29 %pMn, de forma que cada composição estivesse em uma região diferente do gráfico de (SCHUMANN, 1972). Porcentagens baixas de Si, Cr e Ni também foram encontradas.

Em relação às composições, a Liga 4 (5Mn-0,15C) pode ser considerada um aço ligado com Mn, em que o Mn desempenha papel de elemento de liga mas não causa mudanças drásticas nas propriedades mecânicas.

A liga 3 (11 Mn-0,2C) possui teor de Mn próxima ao da liga Hadfield, uma das primeiras ligas de alto teor de Mn utilizadas e que, possui alta endurecibilidade e alta ductilidade. Porém, o aço Hadfield possui teor de C mais elevado.

A liga 2 possui um teor mais elevado de Mn (20Mn-0,15C) com possível transformação em martensita  $\epsilon$ . Por fim, a liga 1 (29Mn-0,15C) possui o maior teor de Mn e é esperado que esse aço seja TWIP e possua, à temperatura ambiente, austenita estável com formação de maclas por deformação.

Tabela 4 – Composição química dos materiais recebidos de alto teor de Mn

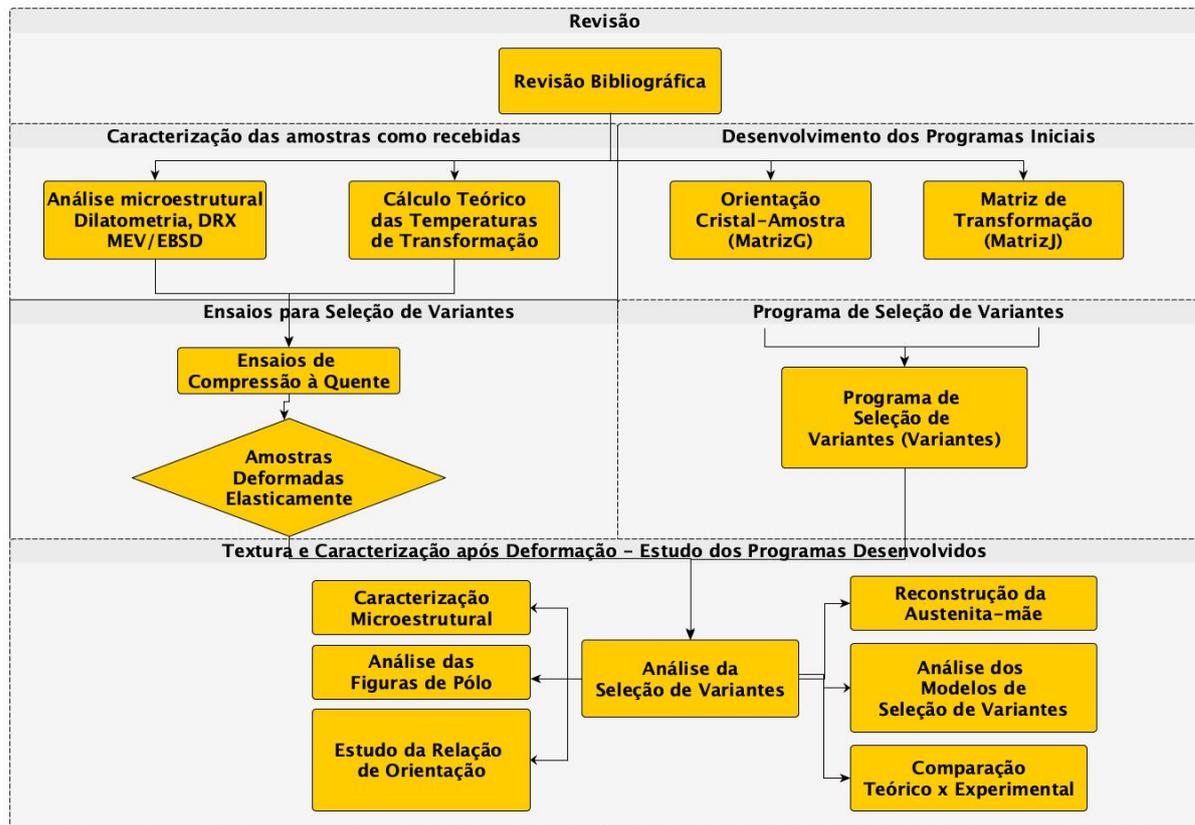
Composição química (% p)						
	Mn	C	Si	Ni	Cr	Fe
Liga 1	29,00	0,15	0,4	0,2	0,45	Bal.
Liga 2	20,00	0,15	0,22	0,22	0,35	Bal.
Liga 3	10,80	0,20	0,07	0,07	0,16	Bal.
Liga 4	4,35	0,15	0,007	0,05	0,10	Bal.

Fonte: autoria própria

## 4.2 Metodologia

A metodologia do trabalho foi dividida em etapas, como mostrada no fluxograma da Figura 24.

Figura 24 – Fluxograma da Metodologia



Fonte: Autoria própria

Como mostrado na Figura 24, a primeira etapa, que esteve presente durante todo o processo, foi de revisão sistemática da literatura. A partir daí, o trabalho se dividiu em duas grandes seções: uma primeira, que envolveu caracterização das amostras, ensaios de compressão e análise das amostras após compressão, e uma segunda de desenvolvimento, avaliação comparativa e aplicação dos programas de seleção de variantes. Nos próximos itens desta tese, estas seções estão explicadas em relação ao método utilizado.

### 4.2.1 Caracterização Inicial

Os materiais como recebidos foram caracterizados segundo sua microestrutura e textura cristalográfica. A caracterização foi realizada através de microscopia óptica (MO), microscopia eletrônica de varredura (MEV) com auxílio da técnica de *electron backscatter*

*diffraction* / difração de elétron retroespalhado (*EBS*D), e difração de raios-X (*DR*X).

Inicialmente, os materiais foram cortados em amostras, lixados e polidos. O polimento eletrolítico foi realizado na Lectropol 5 da Struers, com eletrólito de 10% ácido perclórico e 90% de ácido acético, tensão de 10 V e tempo de 300 s. A temperatura do polimento ficou em torno de 22°C a 25°C. A corrente se manteve constante em 0,15 A. O reagente utilizado para ataque por imersão foi Nital 2% para as análises microestruturais.

As difrações de raios-X foram realizadas utilizando radiação de Co-K $\alpha$  ( $\lambda = 1.7902$  Å) com 40 kV e 45 mA. Todas as medições foram feitas utilizando um difratômetro da PANalytical®, modelo X'Pert Pro, com um passo de 0.02° e um intervalo angular de 45–120° com um monocromador. Foi utilizada uma fenda divergente de 2° e uma fenda receptora de 1,5 mm. Para tratamento de dados, foi utilizado o programa da PANalytical®, X'Pert HighScore. O refinamento Rietveld foi realizado pelo software GSAS.

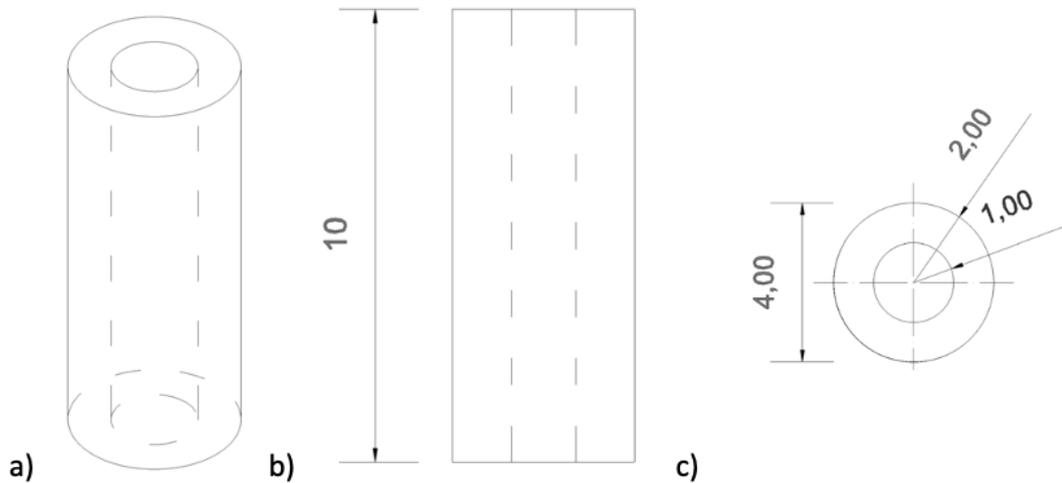
EBSD foi realizado em um microscópio de *field emission gun* / canhão de emissão de campo (*FEG*), FEI modelo Quanta 450, operando com uma voltagem de 20kV, tilt angle de 70°, distância de trabalho de 12 mm e *horizontal field width* / comprimento do campo horizontal (*HF*W) de 50 $\mu$ m ou 150 $\mu$ m. Para as análises, além da preparação metalográfica usual, foi realizado um polimento final em sílica coloidal com 0.04  $\mu$ m.

Ainda na caracterização das amostras como recebidas, foram realizados estudos de dilatométrica para estimar a temperatura de início de transformação martensítica (*M*<sub>i</sub>) para cada liga com Mn. As amostras foram retiradas na direção transversal e usinadas em cilindros vazados com 10 mm de altura, 4 mm de diâmetro externo e 2 mm de diâmetro interno (Figura 25).

Todos os ensaios de dilatométrica foram realizados em um dilatômetro BAHR DIL 805 A/D com termopar do tipo S da Escola Politécnica na Universidade de São Paulo. As rampas de aquecimento e de resfriamento foram de 5 °C/s e a temperatura de tratamento foi de 800 °C, como mostrado na Figura 26. A temperatura de 800 °C foi escolhida por ser uma temperatura de austenitização para todas as amostras.

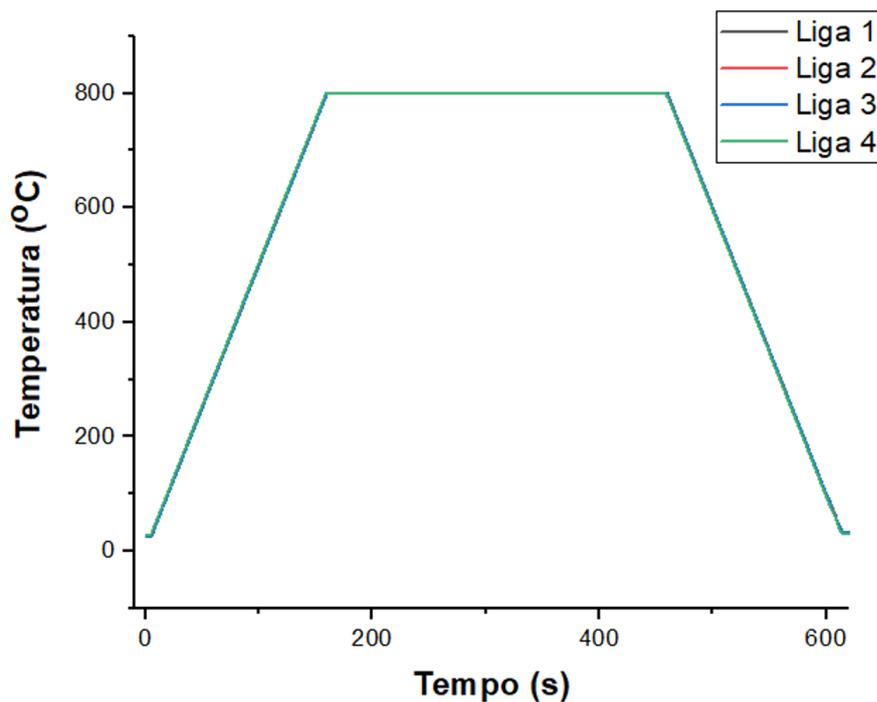
Textura cristalográfica pode ser induzida de várias formas. Neste trabalho, a fim de definir as regiões elástica e plástica para cada liga, todas foram submetidas à ensaio de compressão à quente até a região plástica, nas mesmas condições dos ensaios posteriores, com compressão a 500 °C após austenitização.

Figura 25 – Esquemático das dimensões da peça para ensaio de dilatometria: a) vista isométrica, e b) vista lateral e c) vista superior. Escala 10:1. Medidas em mm



Fonte: Autoria própria

Figura 26 – Ciclo térmico medido no ensaio de dilatometria



Fonte: Autoria própria

Definida a região elástica, os materiais foram aquecidos acima da temperatura de austenitização, 800 °C, mantidos por 5 min, resfriados a uma temperatura acima da  $M_i$  (500 °C) e comprimidos na fase elástica. A deformação elástica foi utilizada para deformar a fase austenítica e a fase produto (martensita) foi transformada a partir da fase mãe comprimida. Portanto, essa compressão foi mantida até o resfriamento à temperaturas inferiores a temperatura

de fim de transformação martensítica ( $M_f$ ) de cada liga ou à temperatura ambiente, o que acontecer primeiro.

As amostras utilizadas para os ensaios de compressão possuíram dimensões de 10 mm de altura, 10 mm de comprimento e 5 mm de espessura, aproximadamente. A tensão de compressão imposta nas amostras foi de 50 MPa. Foi utilizado um equipamento de ensaio universal EMIC de até 100 kN de força com forno acoplado.

Após os ensaios de compressão, as amostras foram cortadas à meia altura para análise de forma a descartar regiões que pudessem sofrer com uma força não homogênea e com o atrito com a máquina do ensaio (regiões próximas à superfície em contato).

As amostras após ensaio de compressão foram caracterizadas segundo sua microtextura seguindo a metodologia já descrita anteriormente. A seleção de variantes seguiu o modelo de Patel-Cohen e o modelo de Humbert.

#### 4.2.2 *Notação e Convenções para Cálculos de Variantes*

Nesta tese, será utilizada a notação usada por Bhadeshia (1987) para definição das matrizes, vetores e bases. Os exemplos aqui indicados, estão melhor detalhados no livro citado. Os vetores estão indicados em negrito.

Inicialmente, para a definição de vetores, é necessário a definição de uma base para descrever nosso sistema de referência. No caso das transformações martensíticas, é conveniente escolher o sistema de referência como vetores ortonormais (mutuamente perpendiculares entre si e unitários)  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$  que pertencem à célula CFC da austenita (Figura 27). A magnitude desses vetores é igual ao parâmetro de rede  $a_\gamma$  da austenita.

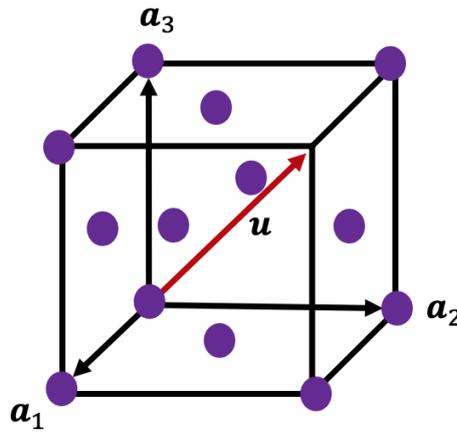
O conjunto de vetores  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$  definidos é uma base vetorial e será simbolizada pela letra maiúscula  $A$ . Dessa forma, um vetor  $\mathbf{u}$ , também mostrado na Figura 27, pode ser definido em termos de  $A$ , pela equação 4.1.

$$(\mathbf{u}; A) = (u_1 u_2 u_3) = (111) \quad (4.1)$$

Quando a representação de  $\mathbf{u}$  é de um vetor linha. Para um vetor coluna,  $\mathbf{u}$  pode ser definido em termos de  $A$  como na equação 4.2.

$$[A; \mathbf{u}] = [u_1 u_2 u_3] = [111] \quad (4.2)$$

Figura 27 – Cristal CFC (austenita) e o sistema de referência  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ . Círculos roxos representam os átomos no cristal



Fonte: Autoria própria

O vetor coluna  $[A; \mathbf{u}]$  pode ser transformado no vetor linha  $(\mathbf{u}; A)$  pela aplicação da transposta.

Definindo a notação para vetores e base, agora podemos compreender a notação de mudança de base. Considerando duas bases distintas  $A$  e  $B$  e um vetor  $\mathbf{u}$ , uma mudança de coordenadas da base  $A$  para a base  $B$  em termos de  $\mathbf{u}$  é dada por uma matriz  $(BJA)$ .

Por exemplo, considerando  $[A; \mathbf{u}] = [111]$  e  $[B; \mathbf{u}] = [021]$  e, ainda, a base  $A$  formada pelos vetores  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$ , e a base  $B$  formada pelos vetores  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  e  $\mathbf{b}_3$ , temos que a transformação de  $\mathbf{u}$  em relação às bases pode ser feita como na equação 4.3.

$$\mathbf{a}_1 = 1\mathbf{b}_1 + 1\mathbf{b}_2 + 1\mathbf{b}_3 \quad \mathbf{a}_2 = -1\mathbf{b}_1 + 1\mathbf{b}_2 + 0\mathbf{b}_3 \quad \mathbf{a}_3 = 0\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{b}_2 + 1\mathbf{b}_3 \quad (4.3)$$

Na forma matricial, podemos representar a equação 4.3 pela equação 4.4.

$$(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3) = (\mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \mathbf{b}_3) \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

A matriz apresentada na equação 4.4 é a matriz de mudança de base  $(BJA)$ . Então,  $(BJA)$  representa a transformação de coordenadas da base de origem  $A$  para a base  $B$ . O contrário, a transformação de coordenadas da base  $B$  para a base  $A$ , é conseguido pela inversa de  $(BJA)$ ,

com notação  $(AJB)$ . O vetor coluna  $[A; \mathbf{u}]$ , inicialmente na base  $A$ , pode ser escrito na base  $B$  através da equação 4.5.

$$[B; \mathbf{u}] = (BJA)[A; \mathbf{u}] \quad (4.5)$$

De forma análoga,  $[B; \mathbf{u}]$  pode ser escrito na base  $A$  pela equação 4.6.

$$[A; \mathbf{u}] = (AJB)[B; \mathbf{u}] \quad (4.6)$$

Para o vetor linha  $(\mathbf{u}; A)$  definido na base  $A$ , a transformação para a base  $B$  se dá pela equação 4.7.

$$(\mathbf{u}; B) = (\mathbf{u}; A)(AJ'B) \quad (4.7)$$

Onde  $(AJ'B)$  é a matriz transposta à  $(BJA)$ . De forma análoga, o vetor linha  $(\mathbf{u}; B)$  pode ser escrito na base  $B$  pela equação 4.8.

$$(\mathbf{u}; A) = (\mathbf{u}; B)(BJ'A) \quad (4.8)$$

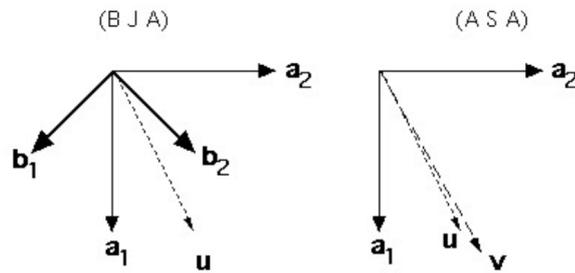
Onde  $(BJ'A)$  é a inversa de  $(AJ'B)$ . Como as bases  $A$  e  $B$  são ortogonais, a matriz de transformação é uma matriz ortogonal, que possui propriedades bem definidas. Por exemplo, sua transposta deve ser igual à sua inversa.

Em relação à transformação martensítica  $\gamma \rightarrow \alpha'$ , uma deformação homogênea transforma o cristal da austenita (CFC) no cristal na martensita  $\alpha'$  (CCC). Essa deformação homogênea é definida através de uma matriz, por exemplo  $(ASA)$ . Como essa matriz não envolve mudança de base, o mesmo símbolo da base  $A$  está escrito nos dois lados da matriz  $S$ . Portanto, podemos representar uma deformação homogênea de um vetor  $[A; \mathbf{u}]$  pela equação 4.9.

$$[A; \mathbf{v}] = (ASA)[A; \mathbf{u}] \quad (4.9)$$

A equação 4.9 converte o vetor  $[A; \mathbf{u}]$  no vetor  $[A; \mathbf{v}]$ , ainda referenciado na base  $A$ . A diferença entre a aplicação da matriz  $(BJA)$  e  $(ASA)$  pode ser melhor compreendida pela Figura 28.

Figura 28 – Diferença entre mudança de coordenadas e matriz de deformação homogênea



Fonte: Bhadeshia (1987)

Como exemplo, para a transformação martensítica  $\gamma \rightarrow \alpha'$ , a deformação homogênea é dada pela deformação de Bain, descrita na equação 4.10.

$$(ASA) = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \frac{a_\alpha}{a_\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \frac{a_\alpha}{a_\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a_\alpha}{a_\gamma} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Onde  $a_\alpha$  representa o parâmetro de rede da martensita  $\alpha'$  e  $a_\gamma$  o parâmetro de rede da austenita.

A partir dessas definições, o modelo de seleção de variantes pode ser descrito.

### 4.2.3 Modelo de Seleção de Variantes

Foram escritos três códigos em linguagem Python para descrever o modelo de seleção de variantes: *matrizJ*, *matrizG* e *Variantes*. Os resultados dos dois primeiros códigos foram utilizados como dados de entrada para o último código. O código de seleção de variantes para martensita  $\alpha'$  já existia (KUNDU, 2007) e estava disponível em FORTRAN em código aberto no site "<https://www.phase-trans.msm.cam.ac.uk>". Esse código foi reescrito em Python, uma linguagem mais atual.

*MatrizJ* é um programa em python para calcular a matriz de transformação entre as fases martensita  $\alpha'$  e austenita. A partir deste código é possível extrair os planos de habito e as deformações desses planos que serão utilizados no *Variantes*. Além disso adicionando-se a matriz de correspondência entre as fases foi possível calcular a matriz de transformação, que também será usada como dado de entrada no programa *Variantes*.

A matriz de correspondência, por definição, é aquela que representa os vetores

representativos da fase produto formados a partir da deformação de vetores correspondentes na fase-mãe. Geralmente, essa matriz pode ser construída por simples inspeção já que suas colunas são formadas por números racionais na base da fase-produto após uma deformação dos vetores na base da fase-mãe.

Na transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$ , a deformação de Bain produz uma deformação do cristal da austenita da seguinte forma:

- $[100]_\gamma$  é deformado para  $[110]_\alpha$ ;
- $[010]_\gamma$  é deformado para  $[\bar{1}10]_\alpha$ ;
- $[001]_\gamma$  é deformado para  $[001]_\alpha$ ;

Portanto, a matriz de correspondência dessa transformação ( $\alpha C\gamma$ ) está apresentada na equação 4.11.

$$(\alpha C\gamma) = \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

O esquemático do programa aqui descrito está representado na Figura 29. A metodologia para estes cálculos e exemplos está descrita no livro de (BHADESHIA, 1987). Os dados de entrada foram os parâmetros de rede das duas fases.

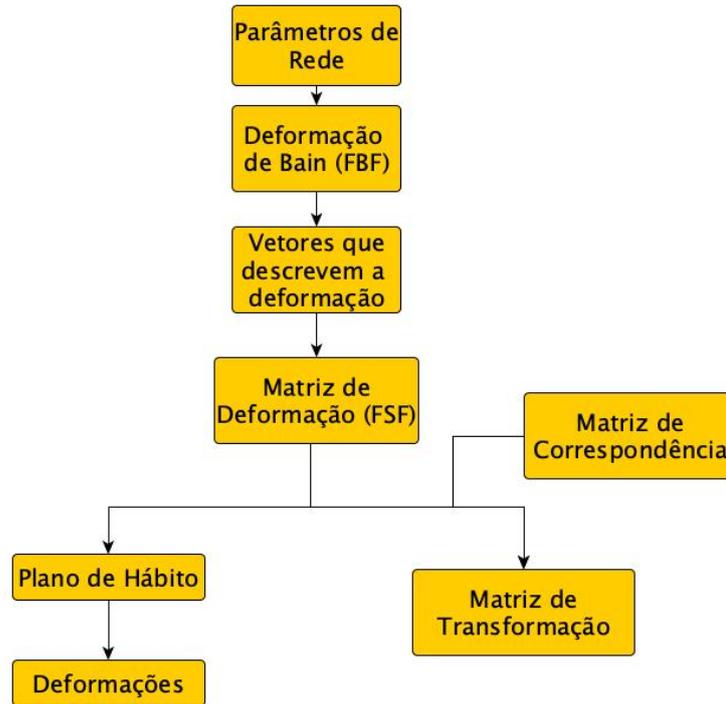
Considerando a transformação entre CFC(austenita) e CCC(martensita  $\alpha$ ), foi considerado que a transformação entre estas fases ocorre através de uma deformação de Bain ( $FBF$ ) combinada com uma rotação de corpo rígido ( $FJF$ ), que deixa uma *invariant line strain* / linha de deformação invariante ( $ILS$ ). Como já mencionado na seção 3.3.2 do capítulo de Revisão Bibliográfica, essa é a forma matematicamente correta de descrever a matriz de deformação ( $FSF$ ), porém a transformação real entre austenita CFC e martensita CCC é através de uma deformação de plano invariante.

Entretanto, a linha de deformação invariante ( $ILS$ ) pode ser dividida em duas deformações de planos invariantes, resultando nas matrizes ( $FPF$ ) e ( $FQF$ ). Em resumo, a transformação para martensita CCC pode ser expressa através da equação 4.12.

$$(FSF) = (FBF)(FJF) = (FPF)(FQF) \quad (4.12)$$

Como mencionado, o código *MatrizJ* tem como dados de saída a matriz de transformação entre as fases, os planos de hábito e as deformações. Porém esse gera apenas os dados

Figura 29 – Esquemático para o código MatrizJ



Fonte: Autoria própria

para a primeira variante (por exemplo, M). Com o objetivo de obter os resultados para todas as variantes, o primeiro resultado foi multiplicado pela matriz de simetria ( $T_i$ ) de cada uma das variantes, como descrito pela equação 4.13. Estas matrizes de simetria estão relacionadas a cada cristal, que possui um número finito de simetria. Para o sistema cúbico existem 24 matrizes e para o hexagonal existem 12.

$$M = T_i.M' \quad (4.13)$$

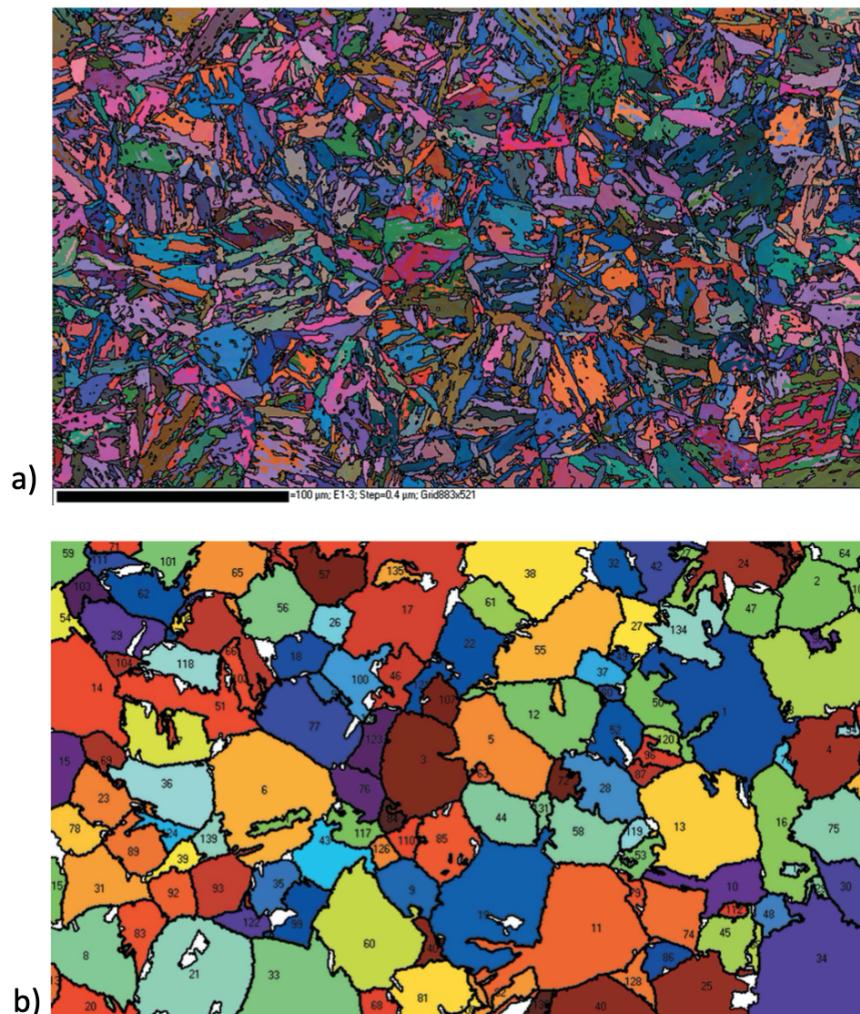
Como descrito na seção 3.3.2 da revisão bibliográfica, a transformação martensítica em  $\varepsilon$  é atingida por uma única deformação de plano invariante. Como consequência, o plano de hábito é racional (equação 4.14). Essa transformação ocorre por uma parcial de Shockley  $a/6\langle 112 \rangle$  a cada dois planos  $\{111\}_\gamma$ . Existem três possíveis direções  $\langle 112 \rangle$  para cada plano  $\{111\}$ . Conseqüentemente, 12 possíveis variantes podem acontecer. Então, os planos de hábito e suas respectivas deformações já são conhecidos e o algoritmo é simplificado. Neste caso, o código MatrizJ não é necessário.

$$(FSF) = (FPF) \quad (4.14)$$

O código MatrixG calcula a matriz de orientação entre o cristal e a amostra a partir dos ângulos de Euler (definição de Bunge) experimentais da austenita obtidos por EBSD ou recalculados a partir de uma reconstrução da fase-mãe. Essa reconstrução, caso utilizada, foi feita de duas formas para comparação: utilizando o programa ARPGE e o código aberto em Matlab, com o toolbox Mtex.

ARPGE é um programa para reconstrução dos grãos da fase mãe, determinar sua orientação e textura, identificar suas variantes e estabelecer métodos estatísticos para melhor compreensão da seleção de variantes. Este foi utilizado para calcular os ângulos de Euler em materiais que não tinham austenita em temperatura ambiente. Os cálculos foram realizados a partir do mapa de EBSD experimental. Alguns exemplos estão mostrados na Figura 30.

Figura 30 – Aço martensítico com nenhuma austenita residual: a) mapa de orientação da martensita e b) austenita reconstruída



Fonte: (CAYRON, 2008)

Então, com os ângulos de Euler da austenita-mãe (medidos experimentalmente ou

reconstruídos), a matriz de orientação ( $G$ ) para a fase austenítica pode ser calculada através de três rotações, mostrado na equação 4.18.

$$g_{\phi_1} = \begin{pmatrix} \cos(\phi_1) & \sin(\phi_1) & 0 \\ -\sin(\phi_1) & \cos(\phi_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

$$g_{\Phi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\Phi) & \sin(\Phi) \\ 0 & -\sin(\Phi) & \cos(\Phi) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

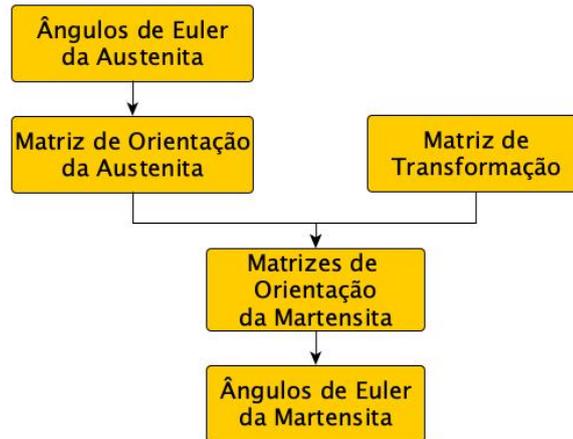
$$g_{\phi_2} = \begin{pmatrix} \cos(\phi_2) & \sin(\phi_2) & 0 \\ -\sin(\phi_2) & \cos(\phi_2) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

$$G = g_{\phi_2} \cdot g_{\Phi} \cdot g_{\phi_1} \quad (4.18)$$

A matriz de orientação para a fase martensita  $\alpha'$  ( $\alpha G \alpha$ ) foi calculada multiplicando a matriz de orientação da austenita pela respectiva matriz de transformação entre as fases (equação 4.19). Então, todas as variantes da martensita  $\alpha'$  puderam ser calculadas (Figura 31).

$$(\alpha G \alpha) = (\gamma G \gamma) \cdot (\alpha J \gamma) \quad (4.19)$$

Figura 31 – Esquemático do código MatrizG

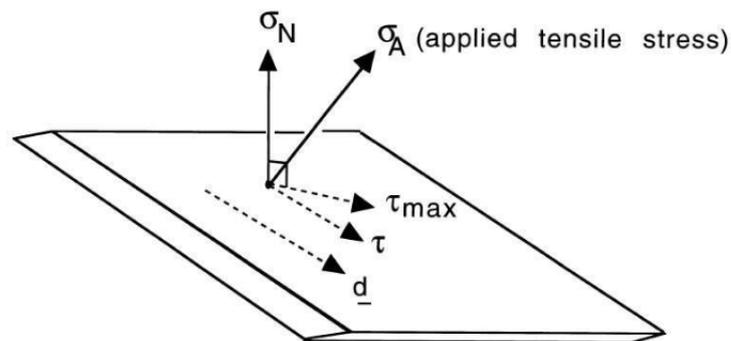


Fonte: autoria própria

Os resultados dos códigos MatrizG e MatrizJ foram utilizados como dados de entrada para o código Variantes. Este código utiliza o modelo de Patel-Cohen (PATEL; COHEN, 1953) para calcular a seleção de variantes em uma transformação de fases entre austenita e martensita.

Se uma determinada tensão for aplicada em um plano ( $\sigma_A$ ), seus componentes podem ser calculados. Figura 32 mostra a decomposição de uma tensão  $\sigma_A$  em termos da tensão normal ( $\sigma_N$ ) e tensão cisalhante ( $\tau$ ). O vetor  $\mathbf{d}$  é a direção onde a tensão de cisalhamento é aplicada.

Figura 32 – Esquemático dos componentes de uma tensão aplicada



Fonte: (KUNDU, 2007)

A energia de interação ( $U$ ), um resultado que pode ser estimado através da tensão aplicada, pode ser calculada (equação 4.20) a partir da tensão de cisalhamento, paralela ao plano de hábito, e da tensão normal, perpendicular ao plano de hábito, e suas respectivas deformações:  $\delta$  and  $\varepsilon$ .

$$U = (\tau \cdot \delta) + (\sigma \cdot \varepsilon) \quad (4.20)$$

Uma energia  $U$  positiva significa que a variante calculada da martensita é favorecida pela tensão aplicada. Assim como, valores de  $U$  negativos significam que a variante não é favorável. Os ângulos de Euler para cada variante foram calculados e os resultados serão mostrados em termos de sua projeção estereográfica. Então, a figura de pólos teórica será comparada com a experimental.

O modelo de Patel-Cohen foi utilizado para martensita  $\alpha'$ . Humbert *et al.* (2007), de forma similar à Patel-Cohen, desenvolveu um modelo para analisar a formação de martensita  $\alpha'$  a partir da transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ . Nos dois modelos, a tensão macroscópica é uniaxial. Então o tensor de tensão fica simplificado à equação 4.21.

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Onde  $\sigma_{11}$  pode ser positivo ou negativo dependendo se a tensão for de tração ou compressão, respectivamente. Para a martensita  $\varepsilon$ , a deformação associada à transformação é dada pela equação 4.22.

$$D^{\gamma \rightarrow \varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

O tensor de deformação pode ser calculado pela equação 4.23

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \cdot (D + D^T) \quad (4.23)$$

onde  $D^T$  é a matriz transposta de  $D$ . Segundo Humbert *et al.* (2007), a análise da simetria do cristal da fase-mãe e da fase-produto neste caso mostra que apenas quatro variantes distintas podem existir. Cada uma delas, pode ser formada por três diferentes tensores de deformação. Para o caso do referencial da amostra, esses tensores estão mostrados na Tabela 5.

Tabela 5 – Quatro possíveis variantes formadas na transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  e suas respectivas matrizes de deformação

Variante	Sistema de Escorregamento	Deformação
V1	(-1-1-1)[-1-12]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} -4 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$
	(111)[-211]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ -1 & -4 & -1 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$
	(111)[1-21]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ -2 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & -4 \end{pmatrix}$
V2	(1-11)[1-12]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & -2 \\ 1 & -4 & -1 \\ -2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$
	(-111)[-1-21]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$
	(-111)[211]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ -2 & 2 & -1 \\ 1 & -1 & -4 \end{pmatrix}$
V3	(11-1)[112]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & -2 \\ 1 & -4 & -1 \\ -2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$
	(-1-11)[-121]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$
	(-1-11)[2-11]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} -4 & -1 & 1 \\ -1 & 2 & -2 \\ 1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$
V4	(-11-1)[-112]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -2 & -1 \\ -2 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & -4 \end{pmatrix}$
	(1-11)[121]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & -4 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$
	(1-11)[-2-11]	$\frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \\ -1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$

Fonte: adaptado de Humbert *et al.* (2007)

O próximo passo é deixar os tensores de tensão e de deformação no mesmo referencial. Humbert *et al.* (2007) utilizaram o referencial da amostra e, então, transformaram o tensor de deformação para este referencial. Para a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  o referencial do cristal tem vantagens ao ser utilizado, pois simplifica o equacionamento, como mostrado por Marechal (2011). Então, utilizaremos  $\mathbf{x} = \langle 112 \rangle_\gamma$ ,  $\mathbf{z} = \langle 111 \rangle_\gamma$  e  $\mathbf{y} = \mathbf{x} \times \mathbf{z}$ . Neste referencial, o tensor de deformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  é simplificado para um cisalhamento puro, como mostrado na equação 4.24.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

A energia de interação, antes calculada pela equação 4.20, pode agora ser simplificada para a equação 4.25. No modelo de Humbert, um fator de 0.5 é adicionado ao cálculo da energia.

$$U = \frac{1}{2} \cdot \sigma_{11} \cdot \varepsilon_{13} \cdot m \quad (4.25)$$

Onde  $m$  é o fator de Schmid para o sistema de deslizamento  $\{111\}_\gamma \langle 112 \rangle_\gamma$ .

Segundo Humbert *et al.* (2007), apenas as variantes com energias mais altas serão as selecionadas, utilizando uma tolerância de 10% para os valores de U, ou seja, um fator de severidade na seleção de variantes de 0,9. Este fator foi utilizado nesta tese.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados estão divididos em duas grandes seções:

- Seção 5.1: Caracterização, Compressão e Análise das Amostras;
- Seção 5.2: Desenvolvimento, Avaliação Comparativa e Aplicação dos Programas de Seleção de Variantes.

Seção 5.1 são os resultados e discussões principais para a caracterização do material como recebido e após ensaio de compressão. Análise das fases, cálculo da EFE e das temperaturas de transformações martensíticas, bem como análise de imagem e o estudo da relação de orientação estão presentes nesta seção.

Seção 5.2 apresenta as principais dificuldades, cálculos comparativos e a aplicação dos programas desenvolvidos nesta tese para aços com alto Mn na presença de transformações martensíticas.

### 5.1 Caracterização, Compressão e Análise das Amostras

#### 5.1.1 Caracterização dos Materiais Como Recebidos

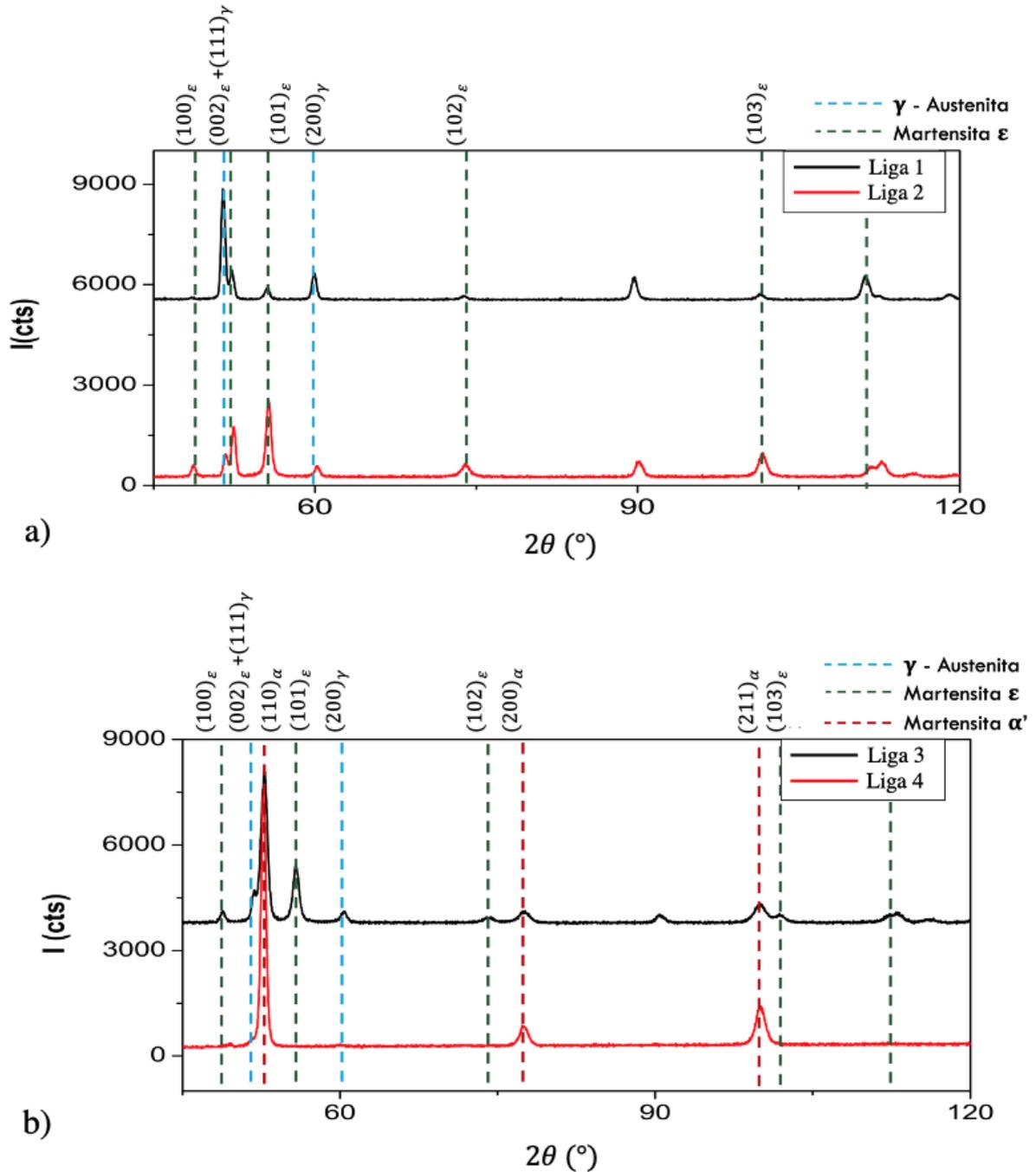
Inicialmente, as amostras recebidas foram caracterizadas por microscopia óptica e eletrônica e DRX. Os resultados da difração de raios-X estão mostrada na Figura 33. A liga 3 foi refinada pelo método Rietveld e os picos dos planos para as fases foram comparados para as outras ligas.

Alguns picos não estão identificados na Figura 33, porém são convoluções de dois outros picos:  $89^\circ$  e  $90^\circ$  são  $\{220\}_\gamma$  e  $\{110\}_\epsilon$ , respectivamente;  $111^\circ$  e  $112^\circ$  são  $\{311\}_\gamma$ ,  $\{112\}_\epsilon$ , respectivamente. Por fim, o pico em  $115^\circ$  é referente ao  $\{201\}_\epsilon$ .

Foi observado que a amostra com maior teor de Mn e a com menor teor de Mn possuem divergências em relação ao previsto por Schuman. Assim, a liga 4 que deveria possuir austenita além de martensita  $\alpha'$ , possui apenas a martensita. A liga 1, que deveria ser totalmente austenítica, possui austenita e martensita  $\epsilon$ .

É de se esperar que existam algumas diferenças nas microestruturas esperadas das ligas em relação ao proposto por Schuman. Já que o último propôs um experimento em ligas ternárias (Fe-C-Mn) e as ligas recebidas possuem teores, ainda que baixos, de Si, Ni e Cr.

Figura 33 – DRX das amostras como recebidas: a) Liga 1 (29Mn-0.15C) e Liga 2 (20Mn-0.15C), b) Liga 3 (11Mn-0.2C) e Liga 4 (5Mn-0.15C)



Fonte: autoria própria

De modo a facilitar a compreensão e reiterar o que foi mostrado pelos resultados de difração de raios-X, a energia de falha de empilhamento para cada liga foi calculada pelo modelo termodinâmico. A metodologia para tal cálculo foi descrita por Ribamar *et al.* (2020). Os resultados estão resumidos na Tabela 6, junto com as fases encontradas por DRX.

Tabela 6 – Energia de Falha de Empilhamento (EFE) calculada e fases encontradas para as ligas como recebidas

	EFE ( $mJ/m^2$ )	Previsão pela EFE	Fases (DRX)
Liga 1	16,42	macla + Martensita $\varepsilon$	Martensita $\varepsilon$ + austenita
Liga 2	0,51	Martensita $\varepsilon$	Martensita $\varepsilon$ + austenita
Liga 3	-13,06	Martensita $\varepsilon$	Martensita $\varepsilon$ + Martensita $\alpha'$ + austenita
Liga 4	-25,08	Martensita $\varepsilon$	Martensita $\alpha'$

Fonte: autoria própria

Segundo Pramanik *et al.* (2018) o mecanismo de deformação de aços com alto teor de Mn é explicado pela acomodação da deformação na fase austenítica pela dissociação das discordâncias em parciais de Shockley, gerando falhas de empilhamento que, conseqüentemente, formarão maclas e/ou martensita  $\varepsilon$ . No caso desse materiais, a maclação ou a formação de martensita  $\varepsilon$  ocorre em planos  $(111)_\gamma$  sucessivos ou alternados (BRACKE *et al.*, 2007).

As temperaturas de início de transformação martensíticas ( $M_i$ ) foram calculadas para as duas fases, segundo equações propostas na literatura que utilizam a composição química como base de cálculo. Para a martensita  $\varepsilon$  utilizou-se a equação proposta para aços com alto teor de Mn de Yang *et al.* (2012) (equação 5.1).

$$\begin{aligned}
 M_i\varepsilon(K) = & 576 - 489 \cdot (\%pC) - 9,1 \cdot (\%pMn) - 17,6 \cdot (\%pNi) - 9,2 \cdot (\%pCr) \\
 & + 21,3 \cdot (\%pAl) + 4,1 \cdot (\%pSi) - 19,4 \cdot (\%pMo) - 1 \cdot (\%pCo) \\
 & - 41,3 \cdot (\%pCu) - 50 \cdot (\%pNb) - 86 \cdot (\%pTi) - 4 \cdot (\%pV) - 13 \cdot (\%pW)
 \end{aligned} \quad (5.1)$$

A temperatura de início de transformação para a martensita  $\alpha'$  também foi calculada, mas segundo a equação 5.2 empírica proposta por Mahieu *et al.* (2002).

$$M_i\alpha'(C) = 539 - 423 \cdot (\%pC) - 30,4 \cdot (\%pMn) - 7,5 \cdot (\%pSi) + 30 \cdot (\%pAl) \quad (5.2)$$

Os resultados das temperaturas estão na Tabela 7.

Tabela 7 – Temperaturas de Início de Transformação Martensítica calculadas

	$M_i\varepsilon$ (K)	$M_i\varepsilon$ ( $^{\circ}C$ )	$M_i\alpha'$ ( $^{\circ}C$ )
Liga 1	232	-41	<273
Liga 2	314	41	-134
Liga 3	377	104	125
Liga 4	-	-	343

Fonte: autoria própria

Para a liga 4 (5Mn-0,15C), com menor teor de Mn, a temperatura de início de transformação martensítica  $\epsilon$  não foi calculada, já que na fórmula de Yang *et al.* (2012) é necessário um mínimo de 11 %p Mn.

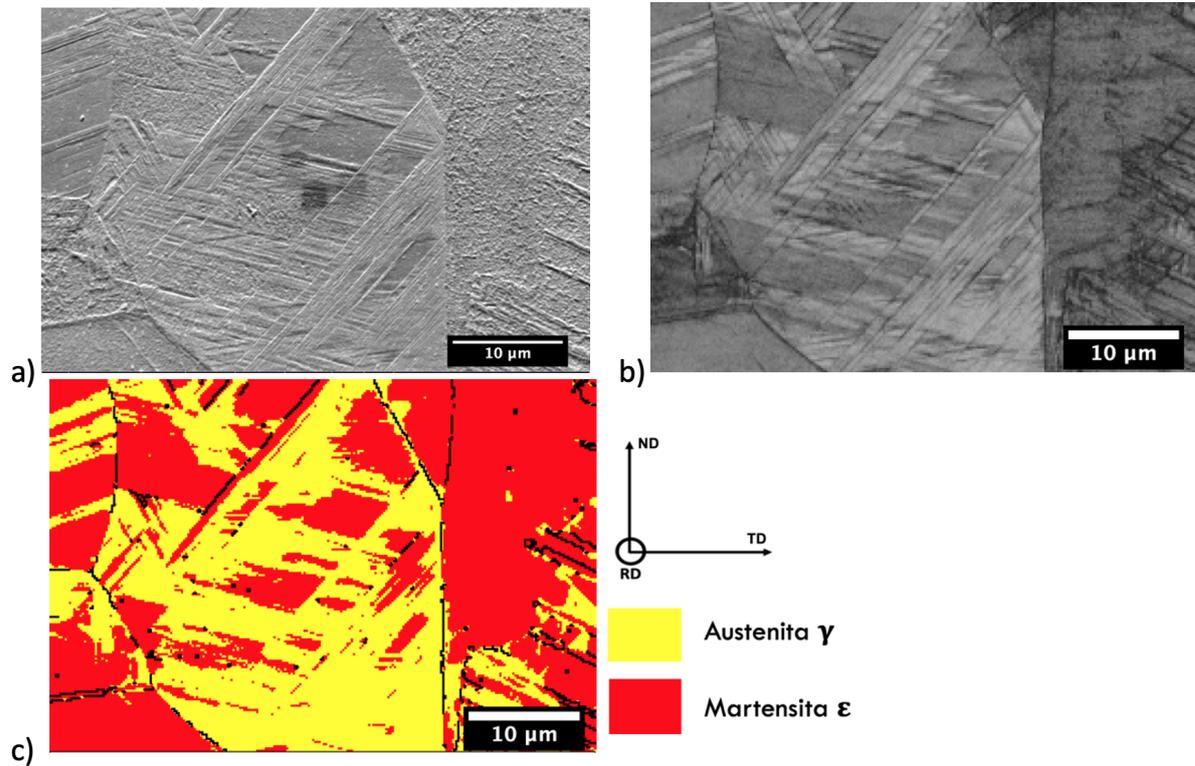
Por meio das temperaturas de início de transformação, nota-se que a liga 1 (29Mn-0,15C) não deve possuir martensita, caso o resfriamento não seja feito à temperaturas negativas (-41 °C para martensita  $\epsilon$ ). Esse resultado é esperado para martensita isotérmica, que se diferencia das transformações atérmicas por ser dependente do tempo. Para amostras em um ciclo de resfriamento contínuo ou submetidas à deformações, é possível encontrar martensitas atérmicas, formadas pela indução de deformações. Dafé *et al.* (2013) em estudo realizado em ligas Fe-17Mn-0,06C mostraram que mesmo em amostras como fundidas, apesar do resfriamento lento, ainda foi possível produzir tensão residual devido à contração durante a solidificação da liga.

Para a liga 2 (20Mn-0,15C), a temperatura  $M_i\epsilon$  está acima da temperatura ambiente e  $M_i\alpha'$  está bem abaixo dela. Portanto, é de se esperar que esta liga em condições de resfriamento até a temperatura ambiente apresente apenas martensita  $\epsilon$ .

No caso da liga 3 (11Mn-0,2C), as duas temperaturas  $M_i\epsilon$  e  $M_i\alpha'$  estão acima da temperatura ambiente. Portanto, apresentarão as duas martensitas à temperatura ambiente. Por fim, a liga 4 (5Mn-0,15C) deve possuir apenas martensita  $\alpha'$  em temperatura ambiente.

Com o auxílio das técnicas de microscopia e difração de elétrons retroespalhados, uma caracterização mais detalhada foi realizada. O contraste de banda mostrada nas Figura 34b e Figura 36b está relacionado à qualidade do padrão de difração de Kikuchi encontrado na amostra (BAEK *et al.*, 2020). O padrão da base de dados é comparado com o padrão de difração medido experimentalmente e quanto mais próximos são, mais clara a região aparece no mapa de contraste de banda. Baek *et al.* (2020) mostrou, em seu estudo de um aço martensítico/bainítico, a possibilidade de diferenciar fases através da análise de contraste de banda. A Figura 34 mostra os resultados para a liga 1 (29Mn-0,15C), com mais alto teor de Mn.

Figura 34 – Caracterização microestrutural da Liga 1: a) Imagem de elétrons secundários, b) Contraste de banda e c) identificação de fases por EBSD

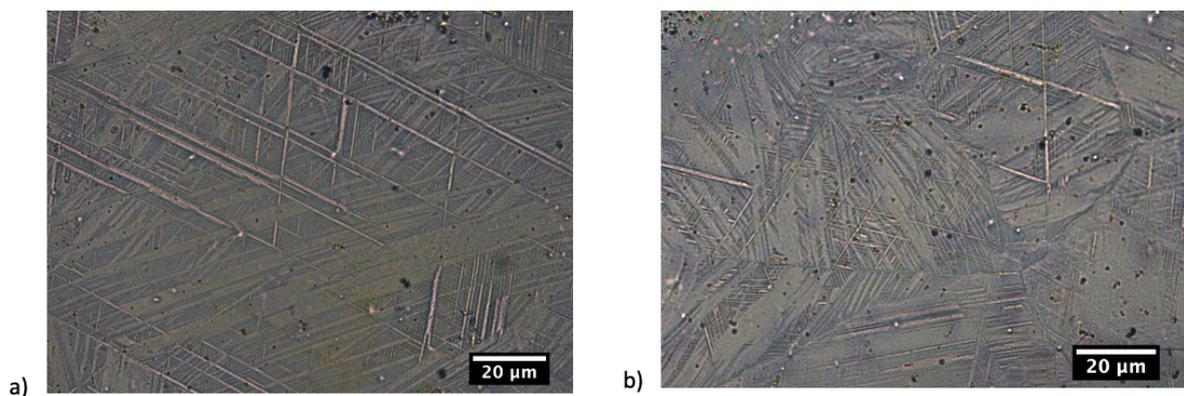


Fonte: autoria própria

Na Figura 34a pode-se notar o contorno do grão austenítico e um certo relevo dentro dele, mostrando que possivelmente existem duas fases distintas. A Figura 34c evidencia a presença das fases austenita e martensita  $\epsilon$ , em que a martensita se formou em forma de placas em diversas regiões do grão austenítico. A Figura 34b mostra o contraste de banda durante a análise em que dentro do grão central, o contraste de banda mostra um bom resultado.

A Figura 35 mostra a caracterização por microscopia óptica da liga 2 (20Mn-0,15C).

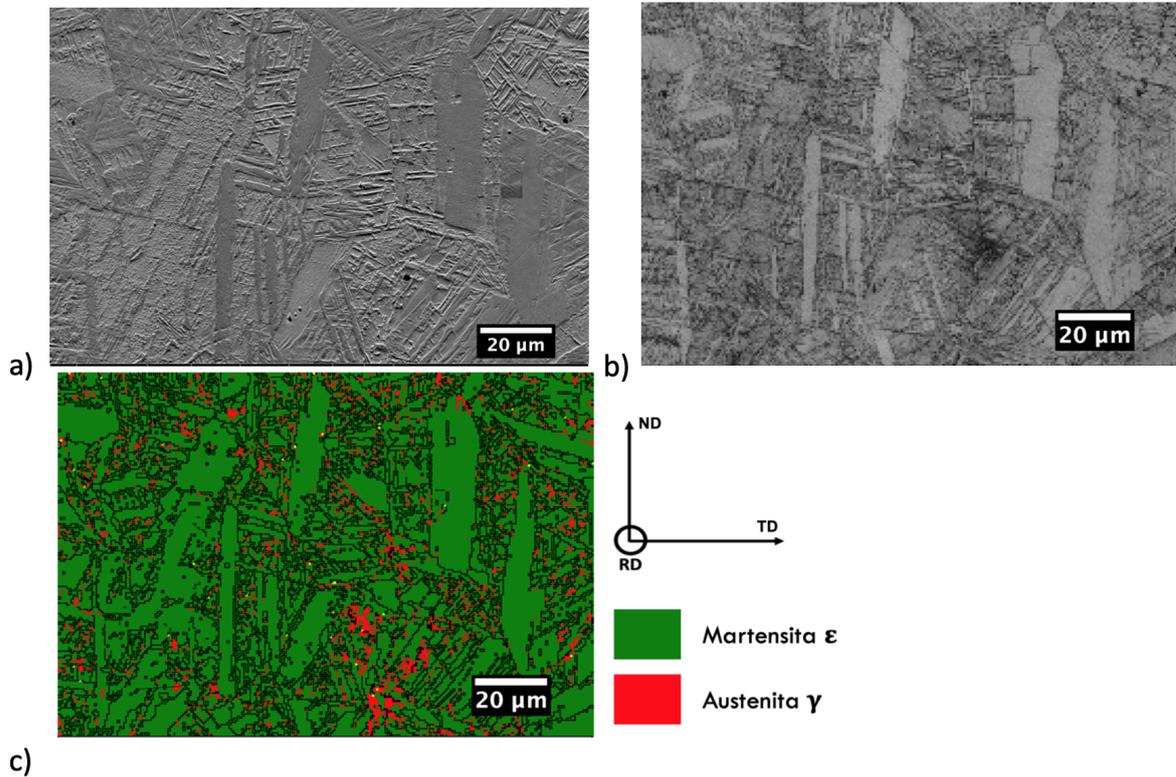
Figura 35 – Caracterização microestrutural da Liga 2: a) e b) mostram regiões distintas da amostra com presença de martensita  $\epsilon$



Fonte: autoria própria

A Liga 2 possuiu uma estrutura bifásica composta de austenita e martensita  $\epsilon$ . É possível notar regiões de martensita  $\epsilon$  com diferentes tamanhos de placas. A Figura 36 mostra a caracterização microestrutural para a liga 3 (11Mn-0.2C).

Figura 36 – Caracterização microestrutural da Liga 3: a) Imagem de elétrons secundários, b) Contraste de banda e c) identificação de fases por EBSD

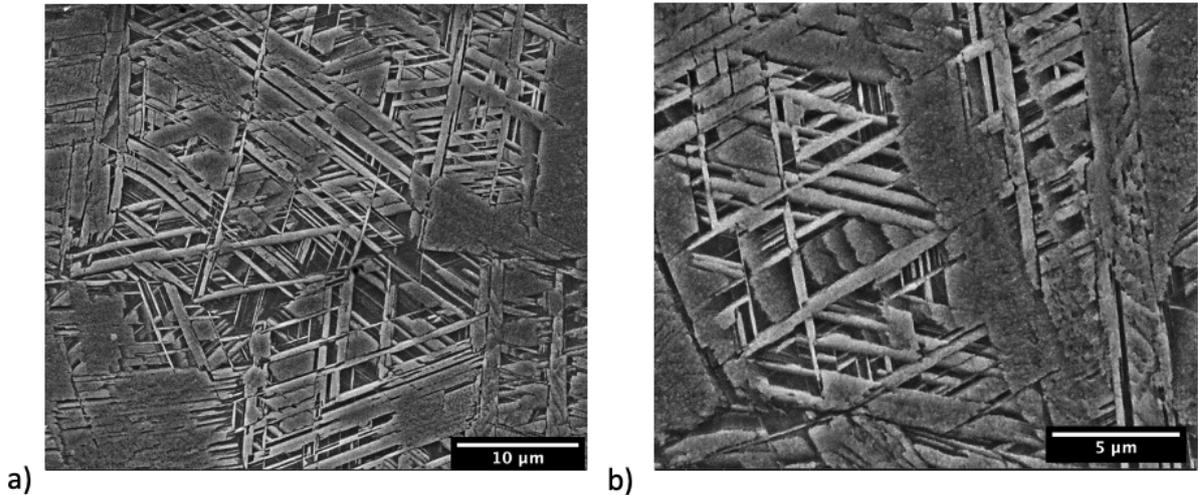


Fonte: autoria própria

A imagem de elétrons secundários (Figura 36a) apresentou uma martensita com regiões de diferentes relevos, apresentando inicialmente uma morfologia próxima de martensita em placas. O contraste de banda se mostrou bom na maioria das regiões analisadas, Figura 36b. Pela caracterização microestrutural, a liga 3 apresentou as fases austenita e martensita  $\epsilon$  (Figura 36c), não aparecendo martensita  $\alpha'$ . A martensita  $\alpha'$  pode estar presente na amostra em regiões de tamanho muito pequeno, sendo de difícil localização. Bracke *et al.* (2007) analisando amostras Fe-18Mn-0,25C-0,04N mostrou regiões de ilhas de martensita  $\alpha'$  na interseção de duas placas de martensita  $\epsilon$ , apenas detectáveis por microscopia eletrônica de transmissão. Essas ilhas foram formadas a partir da deformação da martensita  $\epsilon$ .

Uma imagem mais detalhada da liga 3 dá uma melhor visualização da morfologia da martensita  $\epsilon$ , resultado presente na Figura 37.

Figura 37 – Caracterização microestrutural da Liga 3: a) Imagem de elétrons secundários ressaltando a martensita  $\epsilon$  e b) detalhe da martensita  $\epsilon$

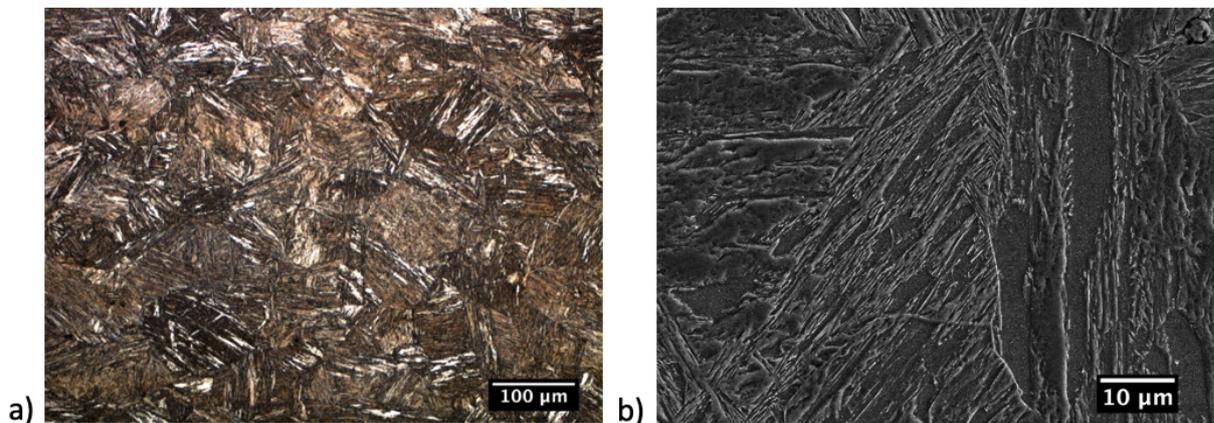


Fonte: autoria própria

Na Figura 37 pode-se notar a morfologia da martensita  $\epsilon$  já encontrada por Maki (1990). Essa morfologia evidencia nos sistemas de deslizamento da estrutura mãe (austenita), direções principais de cisalhamento na qual a martensita se formou.

A Figura 38 mostra a caracterização microestrutural para a Liga 4 (5Mn-0.15C).

Figura 38 – Caracterização microestrutural da Liga 4: a) Imagem por MO, b) Imagem de elétrons secundários



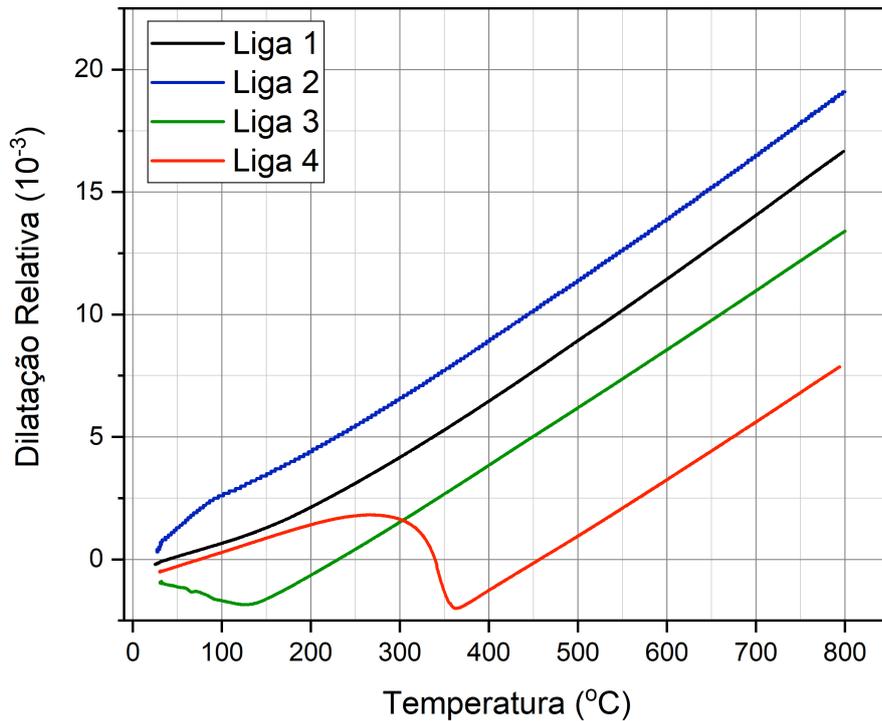
Fonte: autoria própria

Os resultados de caracterização microestrutural da liga 4 mostraram que essa amostra é composta apenas da fase martensita  $\alpha'$ , assim como visto no resultado de DRX para essa liga.

Ainda para caracterizar as amostras como recebidas, os ensaios de dilatomia foram realizados de forma a confirmar as temperaturas de transição de fases. Os resultados estão mostrados na Figura 39.

Em relação à variação de volume que ocorre na mudança de fases, é de se esperar que

Figura 39 – Dilatação relativa no resfriamento



Fonte: autoria própria

entre uma transformação de austenita para martensita  $\alpha'$  no resfriamento ocorra uma expansão devido à modificação de estrutura cristalina  $CFC \rightarrow CCC$  (ANDRÉS *et al.*, 2002).

Durante a transformação de fases de austenita para martensita  $\epsilon$  ( $CFC \rightarrow HC$ ), dependendo da relação entre os parâmetros de rede  $c/a$ , pode ocorrer uma expansão, contração ou nenhuma modificação no volume, como mostrado no apêndice A.

A partir do ensaio de dilatometria, a temperatura  $M_i$  foi calculada pelo método das tangentes. Nesse método, as tangentes às curvas são calculadas e a interseção é o valor aproximado da  $M_i$ . Os resultados estão na Tabela 8.

Tabela 8 – Temperaturas de Início de Transformação Martensítica por Dilatometria

	$M_i\epsilon(^{\circ}C)$	$M_i\alpha'(^{\circ}C)$
Liga 1	-	-
Liga 2	100	-
Liga 3	135	-
Liga 4	-	355

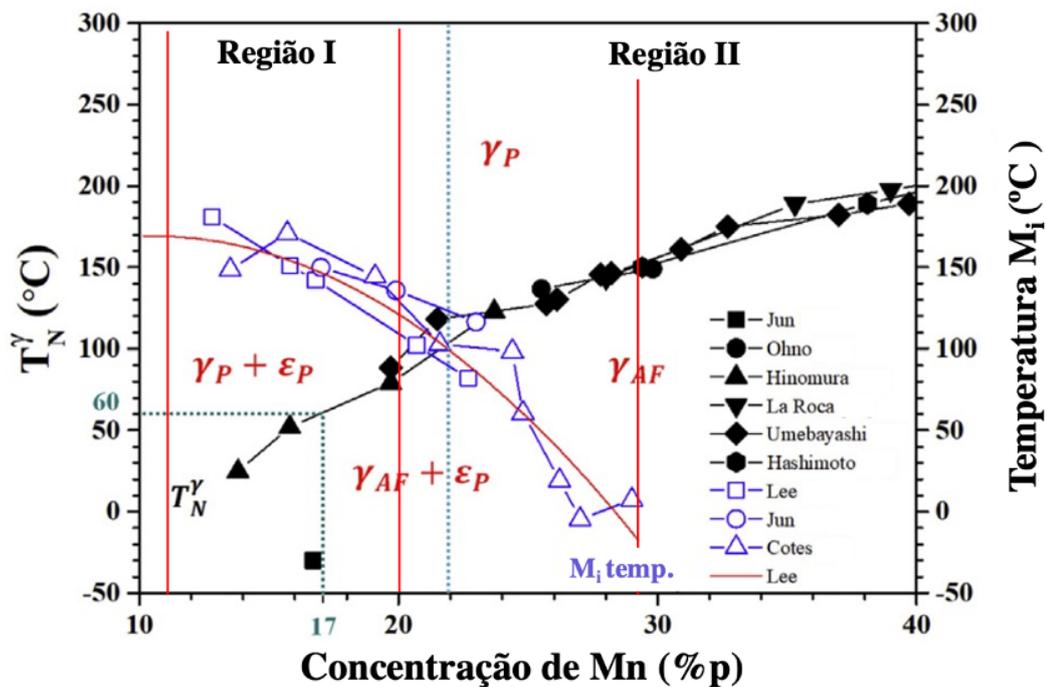
Fonte: autoria própria

No estudo Cotes *et al.* (1998), analisando diversas composições de ligas Fe-Mn-Si e a transformação  $CFC \rightarrow HC$  por dilatometria, algumas ligas não mostraram nenhuma transformação estrutural e em temperaturas próximas a  $390 \pm 20$  K ( $116 \pm 20^{\circ}C$ ), uma mudança

na curva é notada devido à ordem/desordem ferromagnética da austenita. Essa temperatura na qual existe uma mudança do magnetismo da austenita é conhecida como temperatura Néel.

A Figura 40, apresentada no trabalho de Choi *et al.* (2020), mostra a variação da temperatura Néel ( $T_N$ ) e da temperatura  $M_i$  para diversas composições de Mn. Nesta curva, uma importante contribuição é que existem duas regiões distintas: a região I (até 22%p Mn), em que a transformação martensítica inicia antes da mudança de magnetismo da austenita, e a região II (acima de 22%p Mn), em que a transformação martensítica inicia após a mudança de magnetismo da austenita.

Figura 40 – Variação da temperatura Néel ( $T_N$ ) e  $M_i$  com a concentração de Mn para ligas binárias Fe-Mn. Os símbolos  $\gamma_P$ ,  $\gamma_{AF}$  e  $\epsilon_P$  representam austenita paramagnética, austenita antiferromagnética e martensita  $\epsilon$  paramagnética, respectivamente. As linhas verticais em vermelho representam as composições aproximadas estudadas neste trabalho



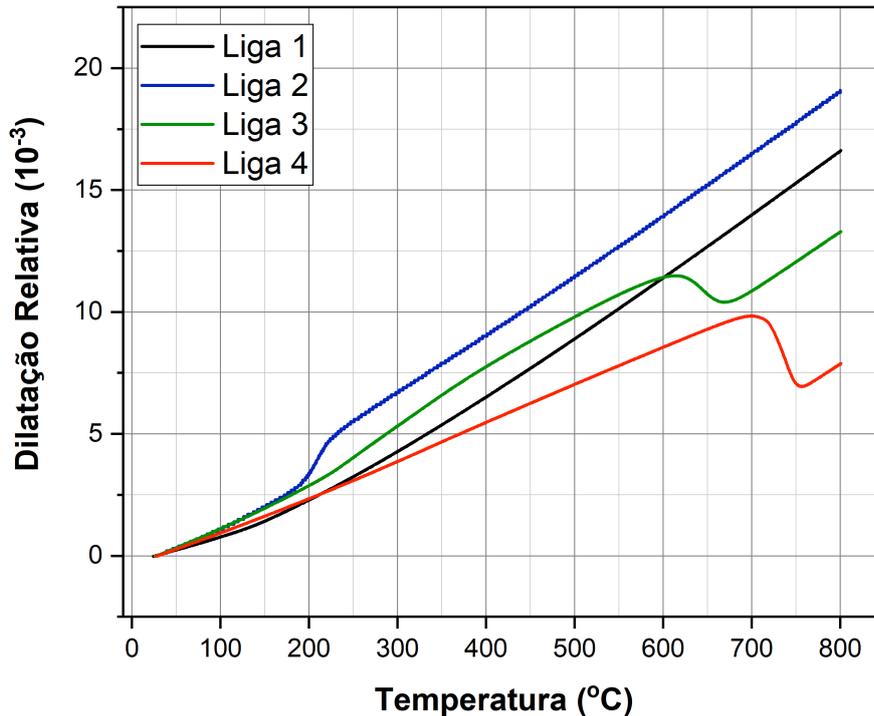
Fonte: adaptada de Choi *et al.* (2020)

Comparando os resultados da revisão feita por Choi *et al.* (2020) com os desta tese, para a Liga 1 tem-se  $T_N = 150^\circ\text{C}$  e  $M_i = 0^\circ\text{C}$ , para a Liga 2 as duas temperaturas  $T_N$  e  $M_i$  estão próximas de  $80^\circ\text{C}$  e para a Liga 3, de forma estimada, tem-se  $T_N = 20^\circ\text{C}$  e  $M_i = 170^\circ\text{C}$ . Dessa forma, para a Liga 1, a pequena variação no comprimento obtida na dilatométrica pode ser resultado da mudança de magnetismo da austenita, enquanto para as outras ligas, são de fato, as temperaturas de início de transformação martensítica.

Além disso, as temperaturas de início de transformação martensítica também ficaram próximas aos cálculos feitos pelas equações, com diferenças de  $\pm 50^\circ\text{C}$ . Essa diferença pode ser explicada por fatores que as equações não levam em conta, como taxa de resfriamento e tamanho de grão.

As temperaturas de transformação  $A_i$  e  $A_f$  também foram medidas (Figura 41) e os resultados estão na Tabela 9.

Figura 41 – Dilatação relativa no aquecimento



Fonte: autoria própria

Tabela 9 – Temperaturas de início de austenitização, no aquecimento, por dilatometria

	$A_i \epsilon (^{\circ}\text{C})$	$A_f \epsilon (^{\circ}\text{C})$	$A_i \alpha' (^{\circ}\text{C})$	$A_f \alpha' (^{\circ}\text{C})$
Liga 1	130	160	-	-
Liga 2	180	260	-	-
Liga 3	220	250	550	710
Liga 4	-	-	670	780

Fonte: autoria própria

As faixas de temperatura de transformação austenítica das ligas que contém martensita  $\epsilon$  são bem baixas quando comparadas à liga 4, que só possui martensita  $\alpha$ . Lü *et al.* (2010), estudando a reversão da martensita  $\epsilon$  em uma liga Fe-22Mn-0,376C deformada a frio, encontrou temperaturas de início e final de transformação austenítica como  $180^\circ\text{C}$  e  $370^\circ\text{C}$ ,

respectivamente. Além disso, a modificação na taxa de aquecimento não alterou essas temperaturas, conseqüentemente, essa transformação acontece de forma adifusional pelo mecanismo de cisalhamento (LEEM *et al.*, 2001).

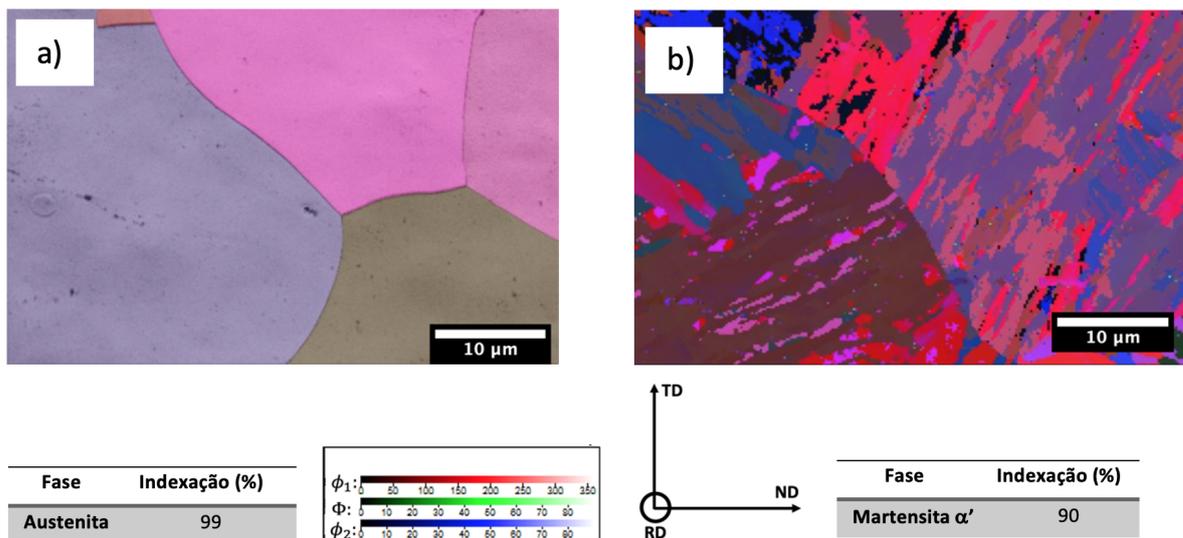
Em um aço Fe-12Mn, Kim *et al.* (2014) encontraram 170 °C e 355 °C como temperaturas  $A_i$  e  $A_f$  para martensita  $\varepsilon$ , respectivamente e 475 °C e 665 °C para  $A_i$  e  $A_f$  para martensita  $\alpha$ , respectivamente. Portanto, nessa liga, com composição próxima à liga 3 (11Mn-0,2C) desse estudo, a martensita  $\varepsilon$  se transforma primeiro, no aquecimento, em austenita e logo após, ocorre a transformação  $\alpha \rightarrow \gamma$ .

### 5.1.2 Caracterização das Amostras Comprimidas

Todas as amostras forma submetidas a ensaio de compressão no regime elástico em temperatura superior à temperatura de austenitização e mantidas com esse esforço até a temperatura ambiente.

A liga 1 (29Mn-0,15C), após ensaio, se manteve com estrutura austenítica, sem transformação de fases ou formação de maclas. A Figura 42a mostra o resultado da análise de EBSD. Já na liga 4 (5Mn-0,15C), houve uma transformação total  $\gamma \rightarrow \alpha'$  (Figura 42b).

Figura 42 – Imagem de contraste de banda e ângulos de Euler para: a) Liga 1 (29Mn-0,15C) e b) Liga 4 (5Mn-0,15C))

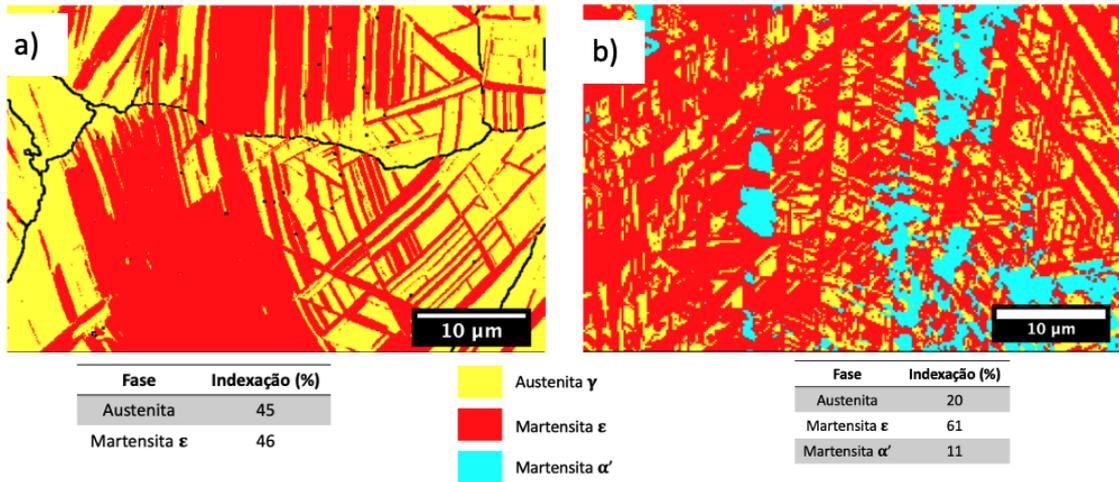


Fonte: autoria própria

A liga 2 (20Mn-0,15C), após compressão, apresentou uma estrutura bifásica contendo austenita e martensita  $\varepsilon$  (Figura 43a). Já a liga 3 (11Mn-0,2C) apresentou austenita, martensita  $\varepsilon$  e martensita  $\alpha'$  após compressão (Figura 43b). Na Figura 43, o mapa de fases mostra em amarelo,

austenita, em vermelho, martensita  $\epsilon$ , e em turquesa, martensita  $\alpha'$ .

Figura 43 – Mapa de fases com os respectivos índices de indexação para: a) Liga 2 (20Mn-0,15C) e b) Liga 3 (11Mn-0,2C)



Fonte: autoria própria

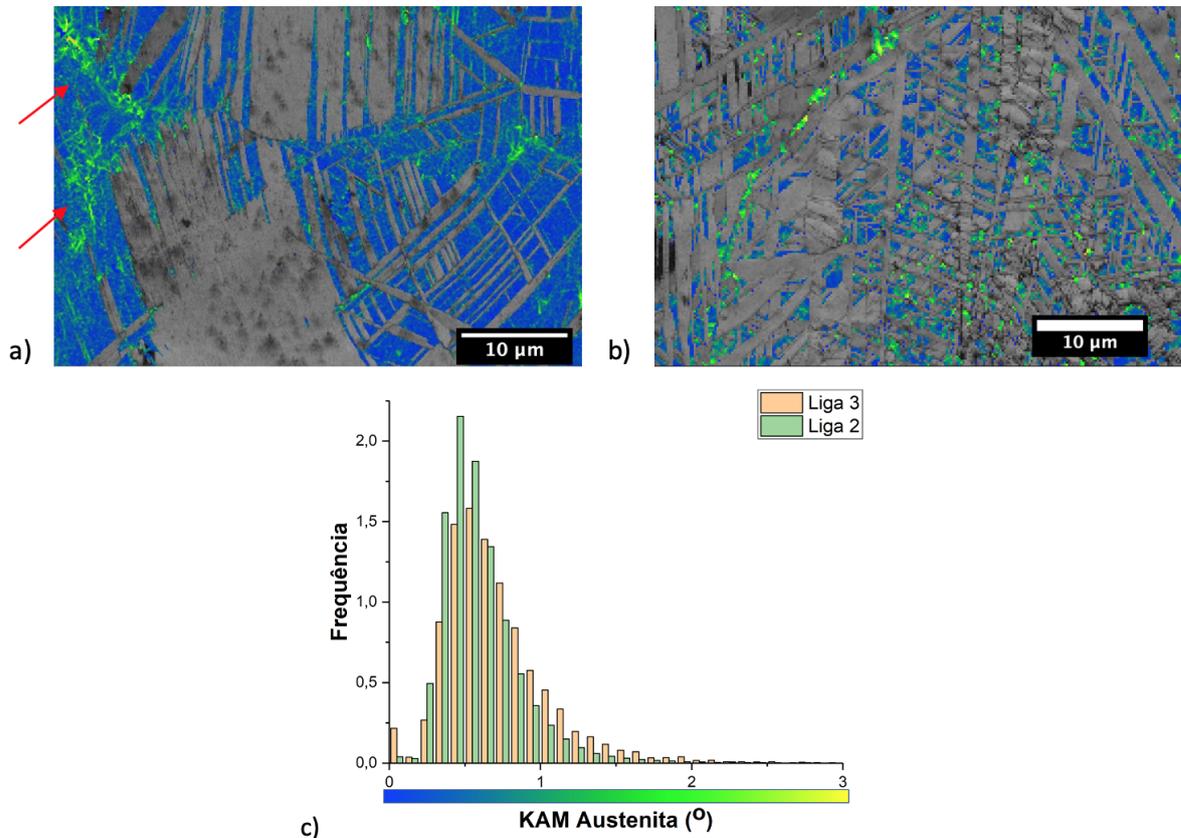
Para a liga 2, a indexação atingiu 91 %, onde 45% foi de austenita e 46% de martensita  $\epsilon$ . Já a liga 3, a indexação atingiu 92 %, onde 20% foi de austenita, 61% de martensita  $\epsilon$  e 11% de martensita  $\alpha'$ .

Ainda nas ligas 2 e 3, a *Kernel average misorientation* / desorientação média de Kernel (KAM) foi analisada para a fase austenítica e está na Figura 44. A análise de KAM é definida como o ângulo médio da desorientação (misorientation) entre um ponto no EBSD e seus vizinhos próximos à uma certa distância (CALCAGNOTTO *et al.*, 2011). Portanto, o ângulo KAM é fortemente dependente da distância selecionada. Nas análises desta tese, ângulos acima de 5° de desorientação foram desprezados.

As duas ligas possuíram uma quantidade grande de martensita transformada. Entretanto, grãos menores da Liga 2 possuíram quantidades menores de martensita  $\epsilon$  formada principalmente no centro dos grãos, não atingindo os contornos (como marcado pelas setas vermelhas da Figura 44a). Estudos mostram que grãos menores e com altos gradientes de orientação podem dificultar o crescimento da martensita  $\epsilon$ .

Wang *et al.* (2013) estudando uma liga TRIP de alto teor de Mn e baixo carbono, Fe-18Mn-3Si-2Al-0,005C (%p), deformada a quente, obtiveram formação de martensita quando a diferença de orientação foi pequena (1,6° a 2,3°) enquanto próximo aos contornos de grão com alto gradiente (2,8° a 4,7°), a formação foi dificultada. Eskandari *et al.* (2018a) em um estudo com alto Mn, Fe-0,07-18Mn-2Si-2Al (%p) acharam resultados em concordância com

Figura 44 – Mapa de contraste de banda e KAM para a fase austenítica da a) Liga 2 (20Mn-0,15C), b) Liga 3 (11Mn-0,2C) e c) histograma



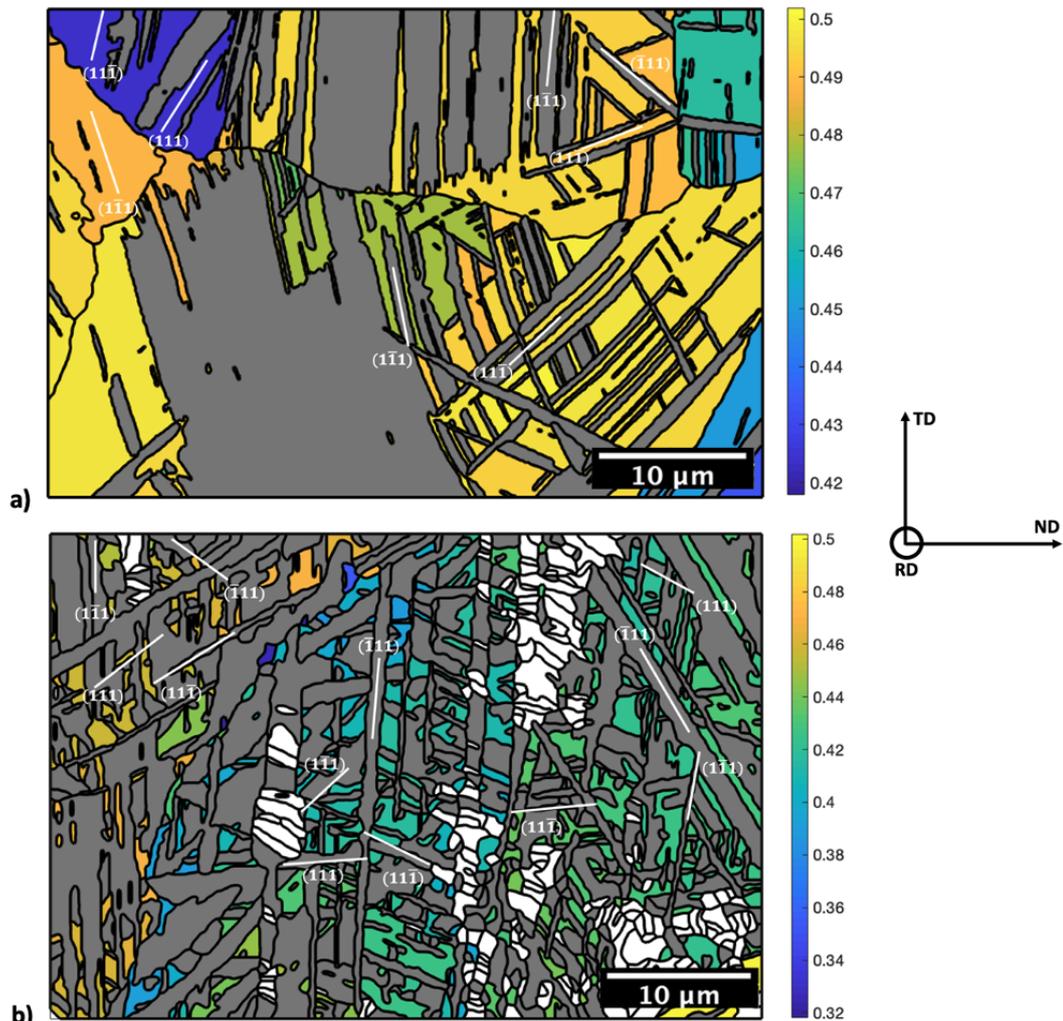
Fonte: autoria própria

Wang *et al.* (2013). Nesse estudo, regiões no centro dos grãos possuíam mais baixo gradiente de orientação ( $0,2^\circ$  a  $1,3^\circ$ ) enquanto próximo aos contornos de grão o gradiente foi maior ( $1,5^\circ$  a  $3,3^\circ$ ), dificultando o crescimento de martensita  $\epsilon$ .

Os resultados encontrados para a Liga 2 (Figura 44a) estão em concordância com os mostrados na literatura (ESKANDARI *et al.*, 2018a; WANG *et al.*, 2013). Nesta liga, o gradiente de orientação no centro dos grãos marcados estão entre  $0,30^\circ$  e  $1,15^\circ$  enquanto próximo aos contornos estão entre  $0,6^\circ$  e  $2,68^\circ$ . Além disso, no grão central, que obteve grande quantidade de martensita  $\epsilon$  transformada, o gradiente de orientação ficou entre  $0,3^\circ$  e  $1,13^\circ$ . Para a Liga 3, o contorno de grão com maior gradiente de orientação ficou por volta de  $0,30^\circ$  entre  $1,7^\circ$ .

Os traços de planos  $\{111\}$  de deslizamento e os fatores de Schmid para austenita nas ligas 2 e 3 estão mostrados na Figura 45. Para isso, os fatores de Schmid foram calculados para o sistema  $\{111\}\langle 110\rangle$  da austenita e os traços foram escolhidos apenas os similares às placas de martensita  $\epsilon$ .

Figura 45 – Traços dos planos de deslizamento  $\{111\}$  e fatores de Schmid para: a) Liga 2 (20Mn-0,15C) e b) Liga 3 (11Mn-0,2C); Martensita  $\epsilon$  em cinza e martensita  $\alpha$  em branco.



Fonte: autoria própria

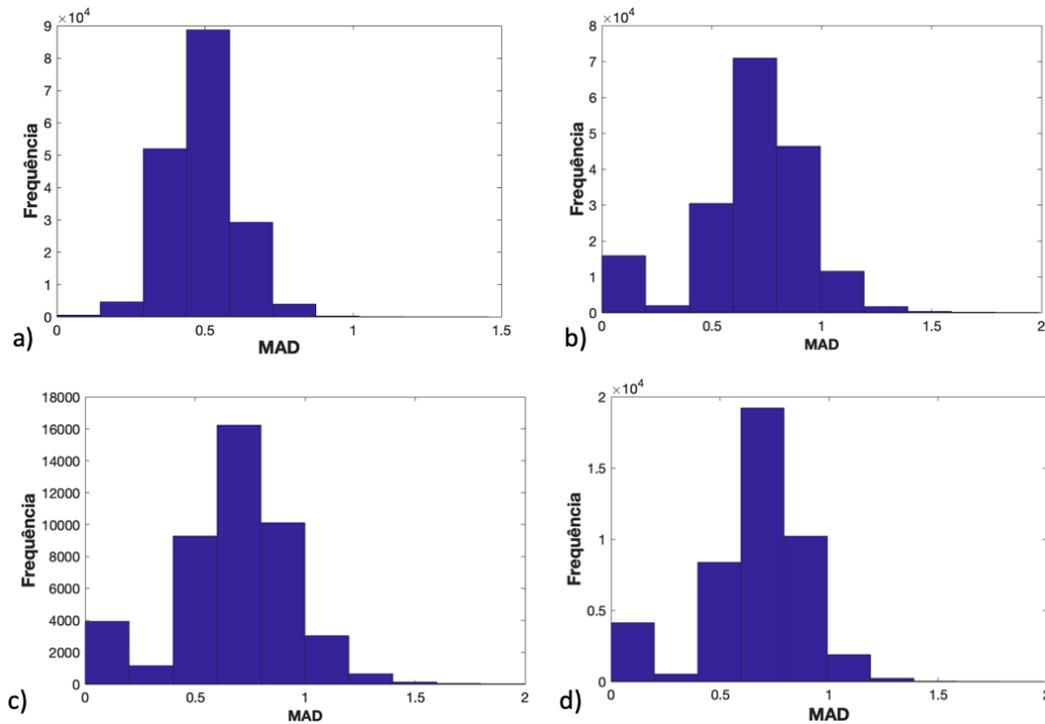
Em relação aos fatores de Schmid, em geral os grãos de austenita da Liga 2 possuíam maiores valores em comparação aos grãos da Liga 3, para as regiões analisadas. Os traços de planos de deslizamento simulados para a austenita mãe coincidiram com as placas de martensita  $\epsilon$  formadas para as duas ligas.

Na liga 2 (Figura 45a), o grão analisado anteriormente com alto gradiente de orientação possui um alto fator de Schmid, valor de 0,49. Porém, apenas uma fina placa de martensita é encontrada. Provavelmente, o gradiente de orientação nesse caso foi uma barreira maior ao crescimento da martensita, mesmo a austenita prévia possuindo uma tendência ao escorregamento, evidenciada pelo fator de Schmid.

Outra análise importante diz respeito ao *mean angle deviation* / desvio médio de ângulo (*MAD*) para cada região analisada. Um padrão de qualidade aceitável para EBSD deve ter

MAD menor que 1. Nas simulações de seleção de variantes, foram utilizadas MAD em torno de 0,5 de forma a assegurar a qualidade dos dados analisados. A Figura 46 mostra os histogramas de MAD para cada mapa mostrado.

Figura 46 – Histograma de MAD para: a) Liga 1 (29Mn-0,15C) , b) Liga 2 (20Mn-0,15C), c) Liga 3 (11Mn-0,2C) e d) Liga 4 (5Mn-0,15C)



Fonte: autoria própria

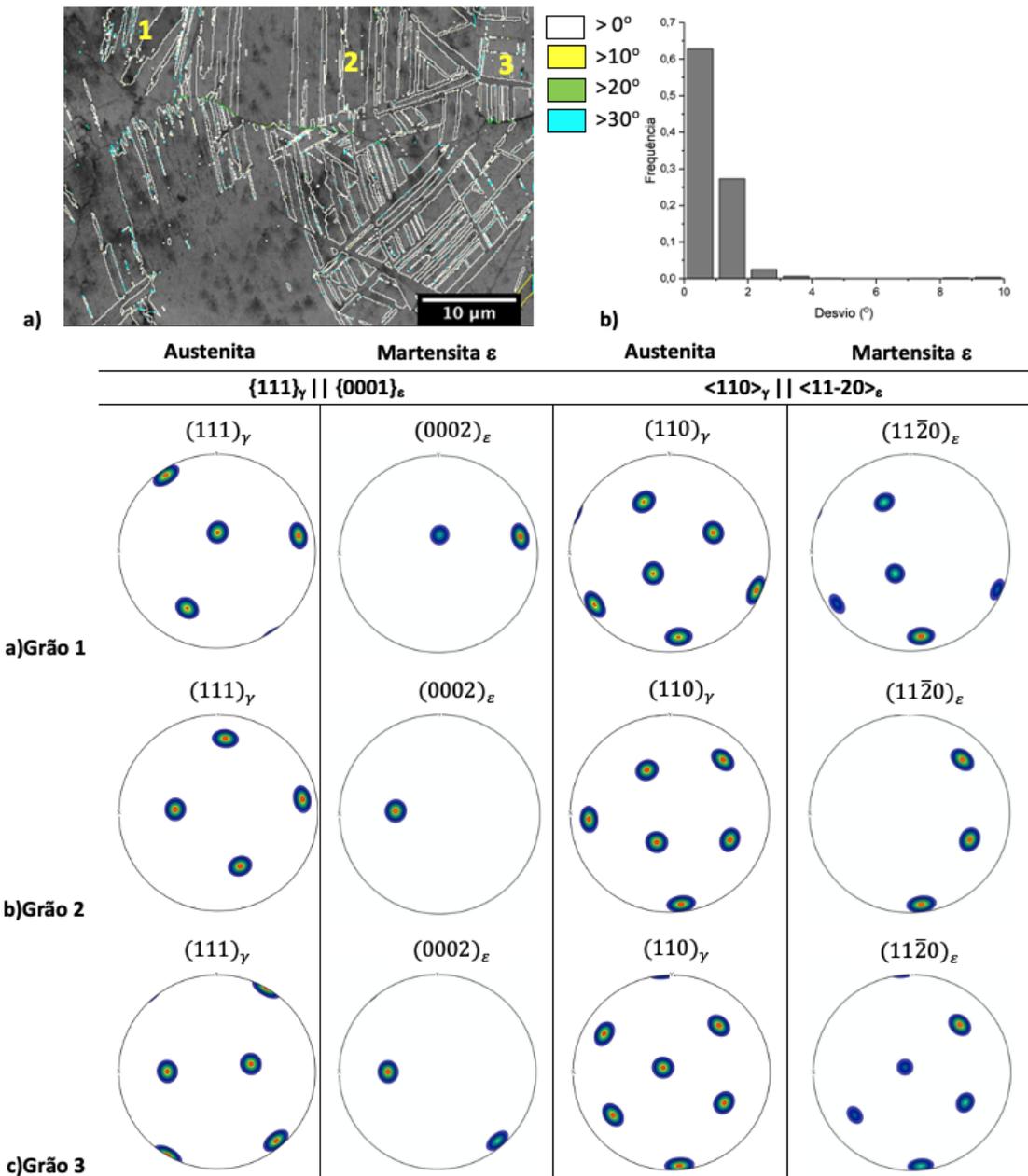
### 5.1.3 Estudo da Relação de Orientação

As relações de orientação entre martensitas e a austenita-mãe são de grande importância no estudo da cristalografia dessas fases. Para a martensita  $\epsilon$ , a relação de orientação é racional e pode ser descrita em termos da relação de Shoji-Nishiyama (equação 5.3).

$$\begin{aligned} \{111\}_{\gamma} \parallel \{0001\}_{\epsilon} \\ \langle 110 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle_{\epsilon} \end{aligned} \tag{5.3}$$

Para esse estudo, um mapa de contornos de grão que representa essa orientação foi construído. Para a liga 2, esses resultados estão na Figura 47.

Figura 47 – Estudo da relação de orientação para liga 2 entre austenita-mãe e martensita  $\epsilon$ : a) Mapa de contraste de banda e contornos de grão indicando o desvio segundo a relação S-N, b) Histograma do desvio, em graus, dos contornos de grão segundo a relação S-N; figuras de polos  $(111)_\gamma, (0002)_\epsilon, (110)_\gamma, (11\bar{2}0)_\epsilon$  para c) grão 1, d) grão 2 e e) grão 3.



Fonte: autoria própria

A Figura 47a mostra um mapa, onde os contornos de grão mostrados são entre austenita e martensita  $\epsilon$ . Dentre esses contornos mostrados, os brancos representam desvios da relação S-N de 0 a 10°, os amarelos representam desvios entre 10 e 20°, os verdes representam desvios entre 20 e 30° e os turquesas representam desvios maiores que 30°.

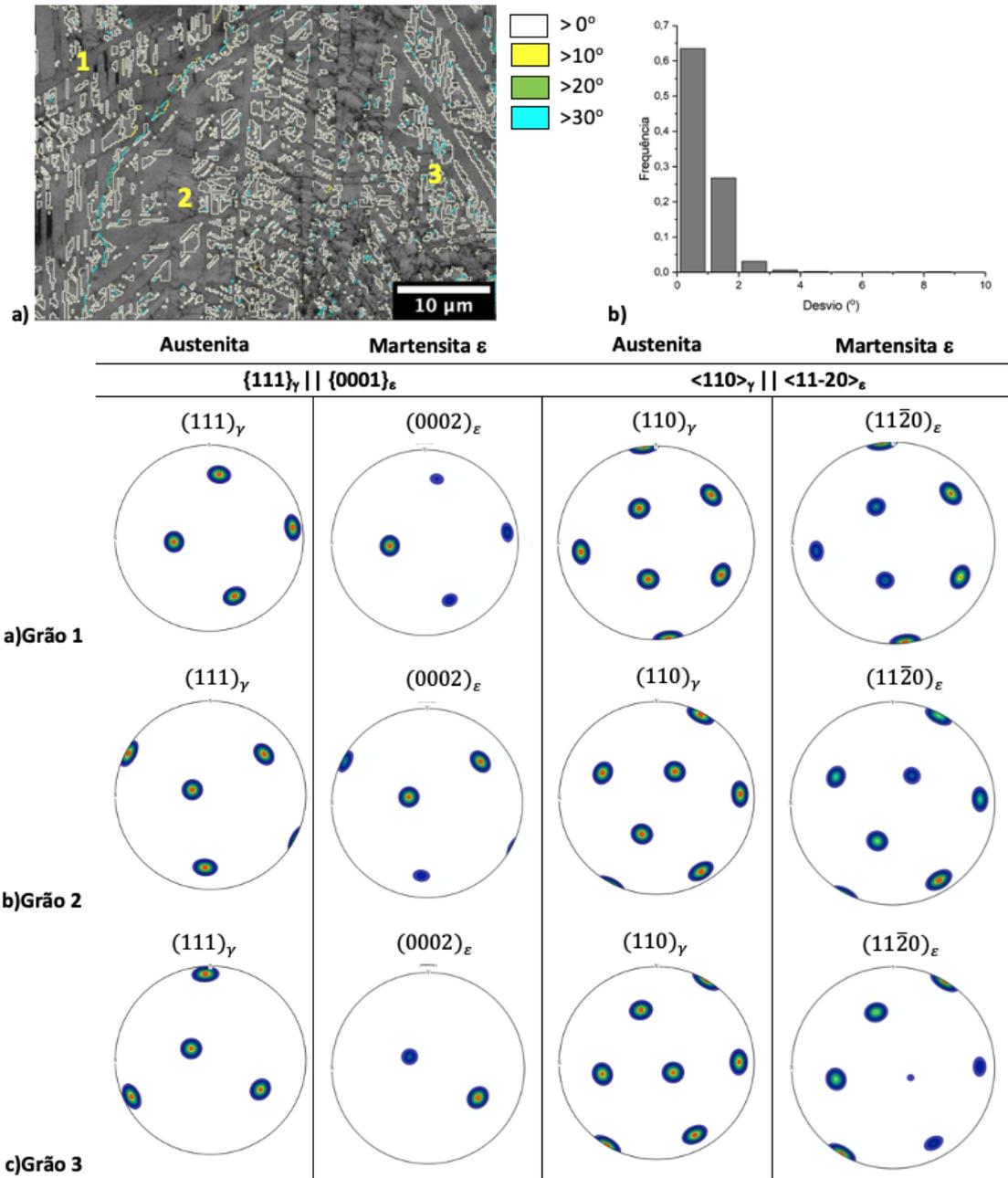
A partir desse mapa e do histograma mostrado (Figura 47b) pode-se perceber que a maioria das regiões entre fases apresentam nenhum ou pequenos desvios da relação S-N. Esta afirmação pode ser comprovada pela análise das figura de polos (Figura 47c-e), onde a figura de polos da martensita  $\epsilon$  apresenta um ou mais variantes em comum com as figuras de polos da respectiva austenita.

Para a liga 3, os resultados do estudo de relação de orientação estão mostrados na Figura 48.

A Figura 48a mostra um mapa, em que os contornos de grão mostrados são entre austenita e martensita  $\epsilon$ . Novamente, dentre esses contornos mostrados, os brancos representam desvios da relação SN de 0 a 10°, os amarelos representam desvios entre 10 e 20°, os verdes representam desvios entre 20 e 30° e os turquesas representam desvios maiores que 30°.

De forma análoga à liga 2, a liga 3 também apresentou uma boa correspondência com a relação de orientação S-N, onde poucos contornos apresentaram altos desvios, o que também pode ser visto no histograma da Figura 48b. Pelas figuras de polos mostradas para os três grãos analisados, as variantes da martensita  $\epsilon$  tiveram uma correspondência exata com seus respectivos pontos na austenita-mãe.

Figura 48 – Estudo da relação de orientação para liga 3 entre austenita-mãe e martensita  $\epsilon$ : a) Mapa de contraste de banda e contornos de grão indicando o desvio segundo a relação SN, b) Histograma do desvio, em graus, dos contornos de grão segundo a relação SN; figuras de polos para a relação SN para: c) grão 1, d) grão 2 e e) grão 3



Fonte: autoria própria

Para a martensita  $\alpha'$ , podem existir diversas relações de orientação com a austenita-mãe. Já que o plano de hábito é irracional, a relação de orientação entre essas fases é apenas uma aproximação do que pode ocorrer. Dentre as relações conhecidas, a de Kurdjumov-Sachs

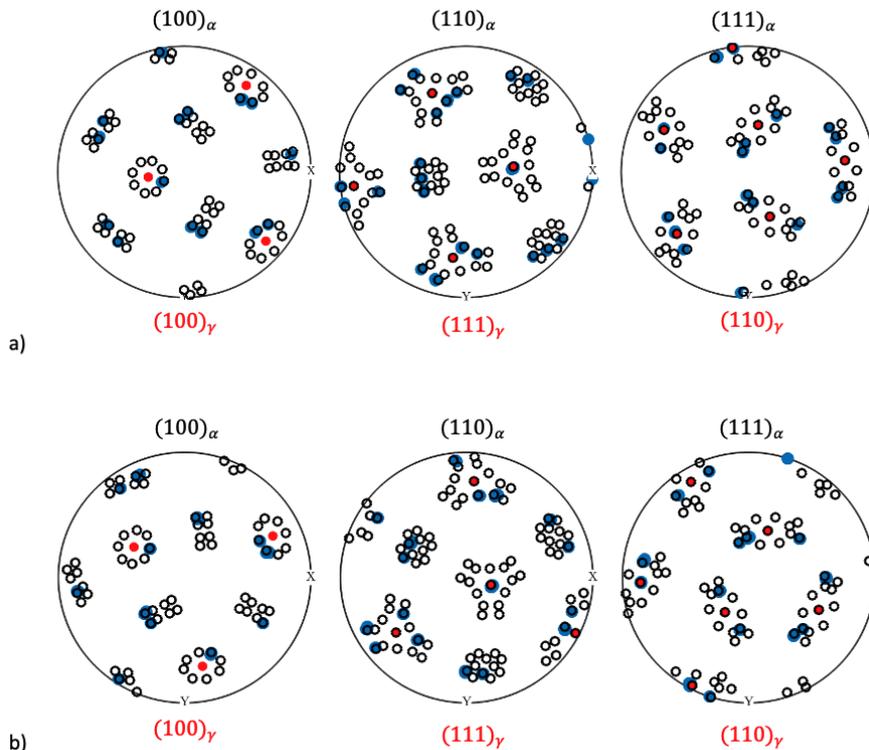
(K-S), equação 5.4, é uma das amplamente utilizadas.

$$\begin{aligned} \{111\}_\gamma || \{110\}_\alpha \\ \langle 110 \rangle_\gamma || \langle 111 \rangle_\alpha \end{aligned} \quad (5.4)$$

A Figura 49 mostra a relação de orientação entre austenita-mãe e martensita  $\alpha'$ , segundo K-S para os grãos 1 e 2 analisados na liga 3. Nela, os pontos em vermelho representam as variantes da austenita-mãe (experimental), os pontos em azul representam as variantes da martensita  $\alpha'$  (também experimental) e os círculos em preto sem preenchimento representam as localizações teóricas das variantes da martensita segundo a relação K-S. As figuras de polos da martensita  $\alpha'$  mostradas foram sobrepostas às respectivas figuras de polos da austenita. Portanto, tendo uma sobreposição entre os polos  $(100)_\alpha$  e  $(100)_\gamma$ ,  $(110)_\alpha$  e  $(111)_\gamma$  e  $(111)_\alpha$  e  $\{110\}_\gamma$

É possível notar que a martensita  $\alpha'$  formada e a austenita-mãe possuem boa correspondência com a relação de orientação KS, tanto para o grão 1 quanto para o grão 2.

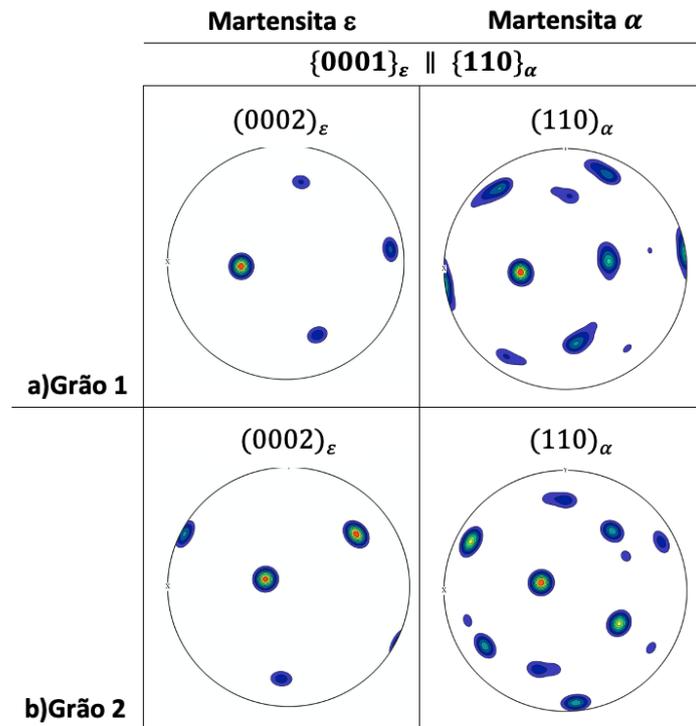
Figura 49 – Figuras de polos para análise da relação de orientação K-S para liga 3 entre austenita-mãe e martensita  $\alpha'$ , pontos em azul representam variantes da martensita  $\alpha'$ , pontos em vermelho representam austenita e pontos pretos sem preenchimento representam as possíveis localizações das variantes segundo a relação KS, para: a) grão 1 e b) grão 2



Fonte: autoria própria

Além das relações entre austenita e martensitas, ainda é possível ter uma relação entre  $\alpha'$  e martensita  $\varepsilon$ . Martensita  $\alpha'$  pode ser formada de duas formas:  $\gamma \rightarrow \alpha'$  ou  $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ . Considerando a segunda forma apresentada, martensita  $\alpha'$  formada a partir da martensita  $\varepsilon$ , esta última pode ser classificada como fase-mãe. Diversos autores (BRACKE *et al.*, 2007; PISARIK; AKEN, 2014; ESKANDARI *et al.*, 2015) mostram que existem um paralelismo entre  $\{0001\}_\varepsilon$  e  $\{110\}_\alpha$ , definido pela relação de orientação de Burgers. Para a Liga 3, as figuras de polos referentes à relação de burgers estão mostradas na Figura 50.

Figura 50 – Estudo da relação de orientação para liga 3 entre martensita  $\varepsilon$  e martensita  $\alpha$ , mostrando a relação de Burgers segundo as figuras de polos para: a) grão 1 e b) grão 2



Fonte: autoria própria

Alguns pontos em comum podem ser vistos comparando as figuras de polos  $\{0002\}$  da martensita  $\varepsilon$  e  $\{110\}$  da martensita  $\alpha$ , deixando clara a presença da relação de orientação. Portanto, de forma geral, as martensitas presentes na liga 3 seguiram o paralelismo descrito nos artigos citados e definidos pela equação 5.5.

$$\begin{aligned} \{111\}_\gamma \parallel \{110\}_\alpha \parallel \{0001\}_\varepsilon \\ \langle 110 \rangle_\gamma \parallel \langle 111 \rangle_\alpha \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\varepsilon \end{aligned} \quad (5.5)$$

## 5.2 Desenvolvimento, Avaliação Comparativa e Aplicação dos Programas de Seleção de Variantes

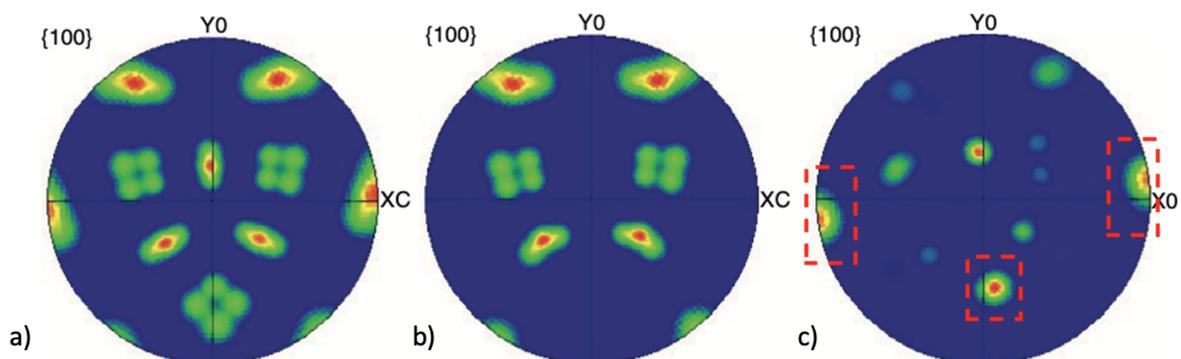
Os códigos desenvolvidos e aplicados nesta tese estão presentes nos apêndices para futuras inspeções, melhorias e comparativos. Os apêndices estão divididos em:

- Apêndice C: Códigos-fontes do programa MatrizJ;
- Apêndice D: Códigos-fontes do programa Variantes;
- Apêndice E: Código-fonte do programa MatrizG;
- Apêndice F: Códigos-fontes das subrotinas utilizadas como funções nos programas principais.

### 5.2.1 Modelo de Seleção de Variantes

O programa do modelo de Patel-Cohen para martensita  $\alpha$  foi escrito por Kundu (2007) em Fortran. Nessa tese, este modelo foi reescrito em linguagem Python mais acessível e utilizada atualmente. Um segundo passo foi comparar os resultados obtidos do programa reescrito com o anterior em Fortran. Para isso, utilizou-se os resultados de Viana *et al.* (2013), que utilizou um aço Maraging 350. A Figura 51 mostra os resultados obtidos por Viana *et al.* (2013) para uma amostra comprimida com deformação plástica de 10% em uma temperatura de 400 °C.

Figura 51 – Figura de polos (100) para amostra deformada a 400°C: a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (8 variantes positivas) e c) experimental

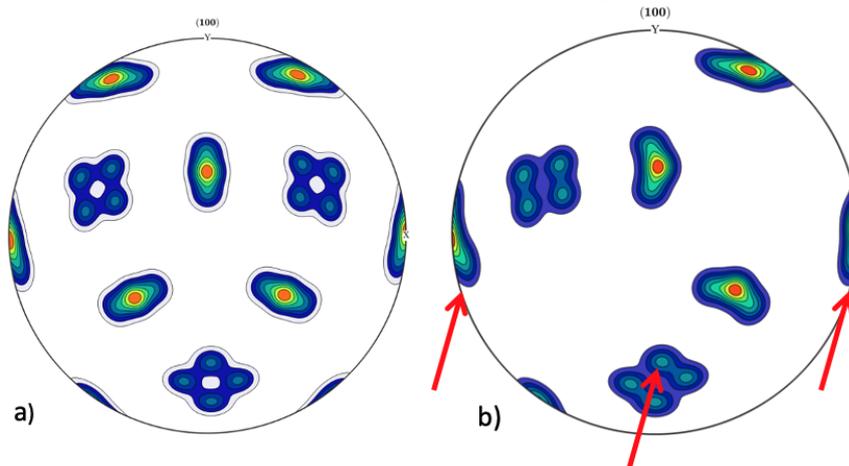


Fonte: adaptada de (VIANA *et al.*, 2013)

Os resultados de Viana *et al.* (2013) mostraram que o programa baseado no modelo de Patel-Cohen não conseguiu prever todas as variantes formadas. Dois problemas podem ser

vistos: variantes extras que aparecem na simulação e variantes com alta intensidade na figura de polos experimental, como, por exemplo, as marcadas em vermelho, que não aparecem na figura de polos simulada. A Figura 52 mostra os resultados obtidos utilizando o programa reescrito em Python. A orientação da austenita, em ângulos de Euler, utilizada foi [  $247^\circ 50, 4^\circ 35, 4^\circ$  ].

Figura 52 – Figura de polos (100) para amostra deformada a  $400^\circ\text{C}$ : a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (8 variantes positivas)



Fonte: autoria própria

A simulação de todas as variantes utilizando o programa reescrito (Figura 52a) foi a mesma encontrada por Viana *et al.* (2013) (Figura 51a), porém a seleção de variantes se mostrou diferente, apresentando todas as variantes mostradas no experimental (setas em vermelho na Figura 52b). Entretanto, ainda existem variantes na figura de polos simulada que não aparecem na experimental.

Os resultados das orientações (ângulos de Euler) da martensita e suas respectivas energias para os dois programas estão na Tabela 10.

Comparando as variantes, suas energias e suas orientações (Tabela 10), pode-se notar que a ordem das energias é a mesma para os dois programas, porém os ângulos de Euler podem ser diferentes. Entretanto, os 24 conjuntos de ângulos de Euler estão presentes nas duas simulações. O número total de variantes previstas foi o mesmo para os dois programas.

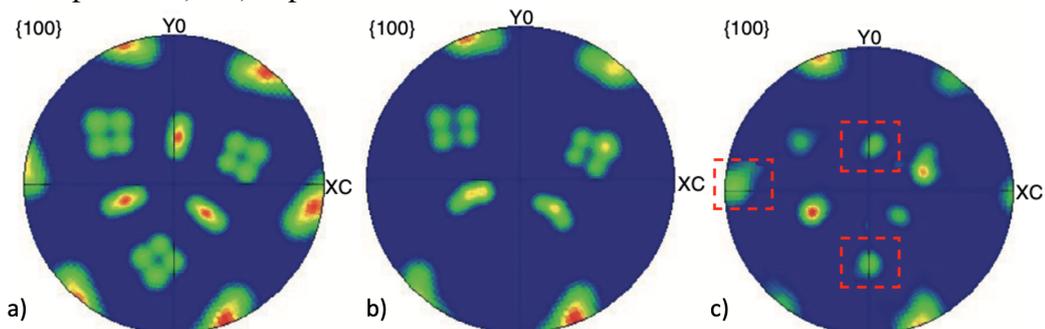
Tabela 10 – Orientação (ângulos de Euler) da martensita  $\alpha$  para amostra deformada a  $400^{\circ}\text{C}$  simulada no programa de Kundu e no *matrizJ* e suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler - Kundu			Energia (J/mol)	Ângulos de Euler - matrizJ		
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$		$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$
V1	102.8	52.3	109.3	-3,47	251,1	41,1	349,1
V2	243.9	59.8	173.8	-3,61	127,7	51,2	273,7
V3	79.5	128.4	289.1	-3,46	291,0	138,2	168,8
V4	67.8	139.3	191.8	-5,65	350,5	62,7	96,1
V5	283.6	125.6	74.6	-6,37	180,1	126,2	181,4
V6	0.1	73.2	181.7	7,55	66,4	119,9	10,9
V7	350.5	62.7	96.1	1,77	67,8	139,3	191,8
V8	251.1	41.1	349.1	-1,16	298,3	119,5	353,4
V9	298.3	119.5	353.4	-3,32	54,3	129,4	93,1
V10	54.3	129.4	93.1	-1,36	102,8	52,3	109,3
V11	115.8	60.8	191.2	-6,26	12,1	65,1	266,5
V12	291.0	138.2	168.8	-1,22	79,5	128,4	289,1
V13	307.6	131.0	269.6	-5,41	182,4	106,8	2,4
V14	2.8	53.8	0.4	7,45	234,4	48,4	90,2
V15	127.7	51.2	273.7	-1,02	243,9	59,8	173,8
V16	170.6	115.1	87.4	1,81	258,7	53,7	254,8
V17	192.3	117.1	277.0	1,76	2,8	53,8	0,4
V18	258.7	53.7	254.8	-6,36	114,2	41,4	12,2
V19	12.1	65.1	266.5	1,72	170,6	115,1	87,4
V20	234.4	48.4	90.2	-5,75	307,6	131,0	269,6
V21	66.4	119.9	10.9	-6,46	283,6	125,6	74,6
V22	180.1	126.2	181.4	7,5	0,1	73,2	181,7
V23	114.2	41.4	12.2	-5,5	115,8	60,8	191,2
V24	182.4	106.8	2.4	7,41	192,3	117,1	277,0

Fonte: autoria própria

A Figura 53 mostra os resultados obtidos por Viana *et al.* (2013) para uma amostra comprimida com deformação plástica de 10% em uma temperatura de  $600^{\circ}\text{C}$ .

Figura 53 – Figura de polos (100) para amostra deformada a  $600^{\circ}\text{C}$ : a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (9 variantes positivas) e c) experimental

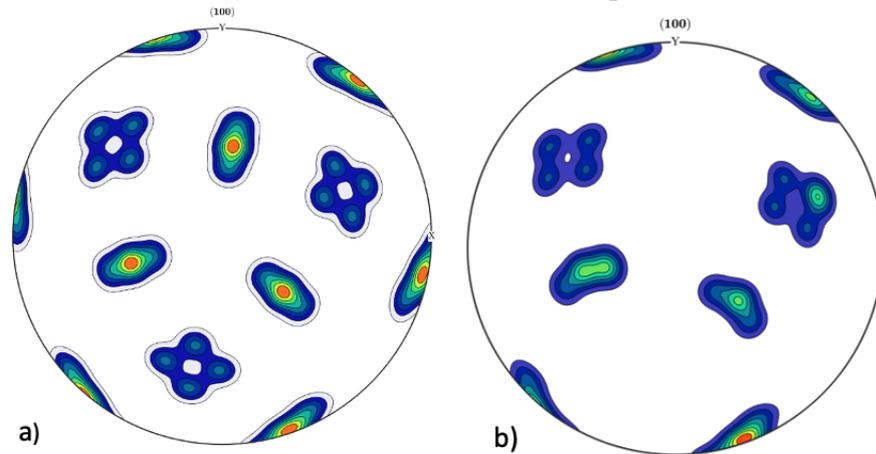


Fonte: adaptada de (VIANA *et al.*, 2013)

Novamente, os resultados mostraram que o programa baseado no modelo de Patel-Cohen não conseguiu prever todas as variantes formadas (destacadas em vermelho na Figura 53c).

A Figura 54 mostra os resultados obtidos utilizando o programa *matrizJ* reescrito em Python. A orientação da austenita utilizada foi  $[110,5 \ 52,6 \ 42,6]$ .

Figura 54 – Figura de polos (100) para amostra deformada a  $600^\circ\text{C}$ : a) Cálculo de todas as variantes, b) Variantes selecionadas pelo modelo de Patel-Cohen (9 variantes positivas)



Fonte: autoria própria

A figura de polos de todas as variantes foram iguais para o resultado de Viana *et al.* (2013) e do programa reescrito. Também, as figura de polos com variantes positivas foram iguais, de modo que ainda existem variantes que não foram previstas pelo modelo. Os resultados das orientações (ângulos de Euler) da martensita e suas respectivas energias para os dois programas estão na Tabela 11.

Comparando as variantes, suas energias e suas orientações (Tabela 11), pode-se notar novamente que a ordem das energias é a mesma para os dois programas, porém a ordem dos ângulos de Euler continuam sendo diferentes. Entretanto, de forma análoga, os dois programas previram as mesmas variantes, apenas com energias positivas com valores diferentes.

Tabela 11 – Orientação (ângulos de Euler) da martensita  $\alpha$  simulada no programa de Kundu e no *matrizJ* e suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler - Kundu			Energia (J/mol)	Ângulos de Euler - matrizJ		
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$		$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$
V1	112.7	43.0	357.7	1,61	112,71	42,98	357,73
V2	358.9	55.3	268.2	-7,08	358,93	55,32	268,23
V3	164.7	135.4	176.6	-6,5	164,65	135,38	176,57
V4	218.1	56.7	96.9	0,64	218,09	56,71	96,85
V5	48.4	132.2	182.0	0,96	48,44	132,24	181,95
V6	291.3	117.7	4.4	1,21	291,29	117,66	4,45
V7	289.5	137.1	183.3	-2,5	289,47	137,13	183,33
V8	335.0	54.3	102.1	-5,13	168,93	116,16	359,11
V9	278.4	126.1	86.8	6,9	278,42	126,08	86,78
V10	168.9	116.2	359.1	-7,22	335,02	54,30	102,15
V11	50.7	112.8	3.2	5,9	240,96	59,27	264,61
V12	302.8	127.5	281.5	2,04	302,80	127,46	281,52
V13	241.0	59.3	264.6	6,64	50,68	112,81	3,17
V14	122.3	54.7	262.2	-1,13	98,18	51,72	96,80
V15	108.8	62.3	180.1	7,69	108,80	62,25	180,14
V16	98.2	51.7	96.8	-0,51	122,34	54,71	262,19
V17	347.8	44.5	4.6	-5,41	231,42	47,81	359,48
V18	231.4	47.8	359.5	-4,23	347,79	44,47	4,62
V19	179.1	126.9	275.3	-5,19	38,32	121,09	86,70
V20	38.3	121.1	86.7	-5,36	179,10	126,88	275,30
V21	228.3	67.2	181.2	-3,4	155,50	123,53	81,55
V22	155.5	123.5	81.6	-3,11	228,29	67,15	181,19
V23	61.3	122.9	279.0	-1,85	346,48	63,96	185,40
V24	346.5	64.0	185.4	-4,39	61,28	122,92	278,99

Fonte: autoria própria

De forma geral, para as simulações comparativas o programa *matrizJ* foi mais assertivo na simulação de seleção de variantes. Algumas diferenças entre os programas foram encontradas, que justificam as diferenças entre os resultados.

No programa *matrizJ*, os dados de saída são os planos de hábito, as deformações envolvidas e a matriz de transformação entre as fases. Para essa última, o cálculo é feito inicialmente encontrando a matriz de transformação ( $\alpha J \gamma$ ), que transforma a base de  $\gamma$  na  $\alpha$ . As diferenças encontradas foram justamente no cálculo das 24 matrizes de transformação.

Kundu (2007) inicialmente em seu programa calcula ( $\alpha J \gamma$ ) e pela inversa, calcula ( $\gamma J \alpha$ ), descrita na equação 5.6.

$$(\gamma J \alpha) = (\alpha J \gamma)^{-1} \quad (5.6)$$

A partir da matriz  $(\gamma J \alpha)$ , ele aplica as matrizes de simetria pela equação 5.7.

$$(\gamma J \alpha)_i = T_i \cdot (\gamma J \alpha) \quad (5.7)$$

onde  $i=1-24$  e  $T_i$  representam as 24 matrizes de simetria do sistema cúbico. Ou seja, Kundu (2007) aplica a simetria do cristal cúbico com relação ao referencial da martensita. De forma divergente, em sua tese Kundu (2007) escreve que:

É conhecido que o sistema cristalino cúbico possui 24 elementos de simetria, cada um pode ser representado por uma matriz. Então, existem 24 matrizes  $(\alpha J \gamma)$ , que são determinadas pela multiplicação da matriz  $(\alpha J \gamma)$  com cada matriz de simetria. Associado a cada  $(\alpha J \gamma)$  estará uma variante do plano de hábito e vetores de deformação.

Então, de forma similar ao que está escrito na tese de Kundu (2007), o programa *matrizJ* foi escrito obtendo as 24 matrizes de transformação  $(\alpha J \gamma)$  como escrito na equação 5.8.

$$(\alpha J \gamma)_i = (\alpha J \gamma) \cdot T_i \quad (5.8)$$

onde  $i=1-24$  e  $T_i$  representam as mesmas 24 matrizes de simetria do sistema cúbico. Em um segundo passo, as matrizes  $(\gamma J \alpha)$  foram obtidas pela inversa de cada uma das 24 matrizes  $(\alpha J \gamma)$ , como na equação 5.9.

$$(\gamma J \alpha)_i = (\alpha J \gamma)_i^{-1} \quad i = 1 - 24 \quad (5.9)$$

Portanto, os cálculos das matrizes de transformação são diferentes e, conseqüentemente, os ângulos de Euler calculados para cada variantes de martensita também poderão ser. Para esclarecer matematicamente as diferenças, consideremos  $(\gamma J \alpha)_{iT}$  as 24 matrizes calculadas nesta tese e  $(\gamma J \alpha)_{iK}$  as 24 matrizes calculadas por Kundu.

Da forma mais geral, a equação 5.10 é verdadeira.

$$(\gamma J \alpha)_{iT} \neq (\gamma J \alpha)_{iK} \quad (5.10)$$

Substituindo as equações 5.9 e 5.7 na equação 5.10 e aplicando as propriedades das matrizes inversa, temos a equação 5.11.

$$(\alpha J \gamma)_{iT}^{-1} \neq T_i \cdot (\gamma J \alpha) \quad (5.11)$$

Aplicando as propriedades das matrizes inversa, temos a equação 5.12.

$$T_i^{-1} \cdot (\gamma J \alpha) \neq T_i \cdot (\gamma J \alpha) \quad (5.12)$$

A equação 5.12 é verdadeira se, e somente se,  $T_i^{-1} \neq T_i$ . Um exemplo que segue a equação 5.12 aplicado às matrizes de simetria do cristal cúbico está mostrada na equação 5.13.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.13)$$

Porém, existem casos em que  $T_i^{-1} = T_i$ , como exemplificado na equação 5.14. Nesses casos, os ângulos de Euler posteriormente calculados no programa *matrizJ* serão iguais aos de Kundu (2007). Esse desenvolvimento justifica, então, porquê existem variantes em comum e porquê outras diferem.

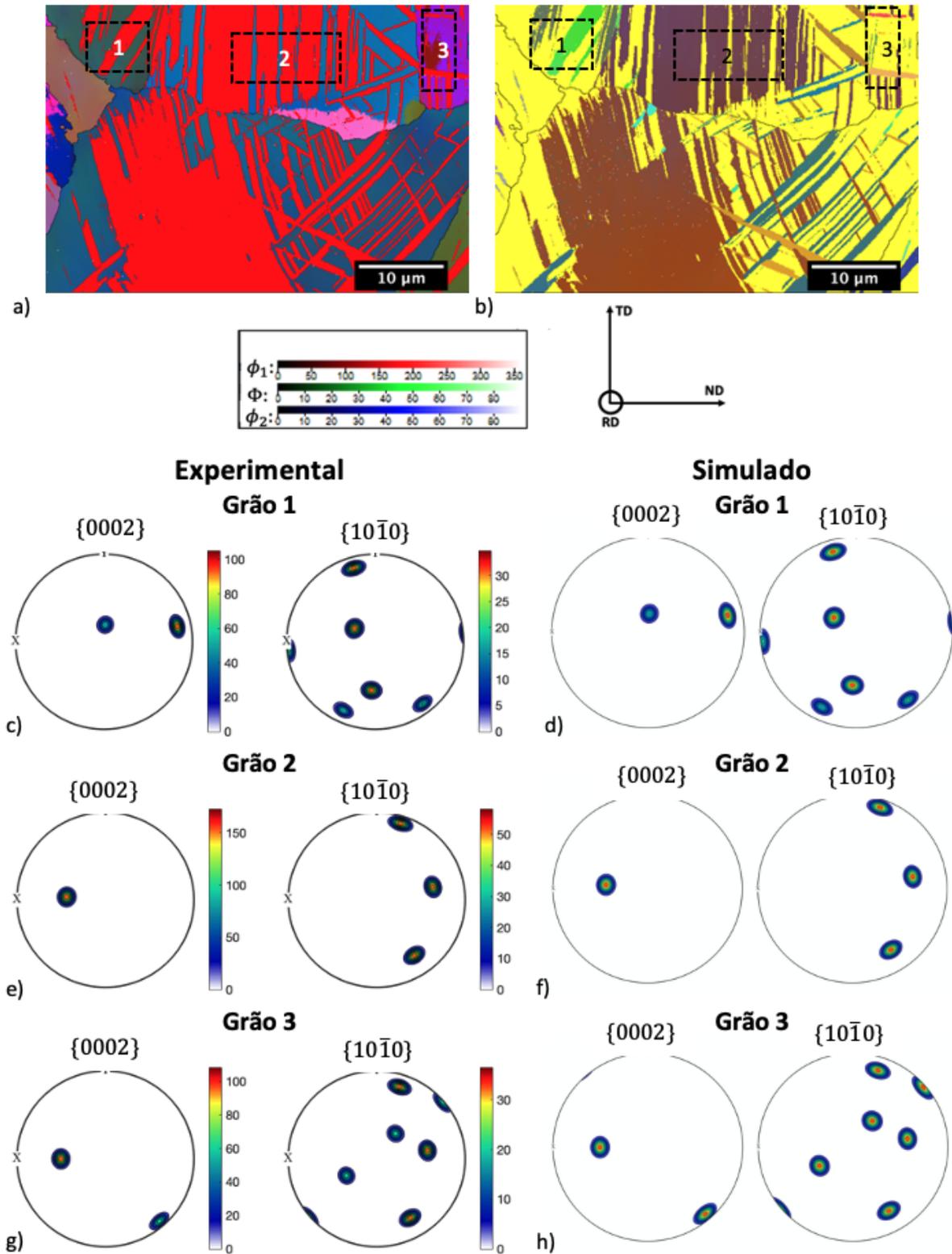
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.14)$$

### 5.2.2 Seleção de Variantes das Amostras Submetidas à Compressão

O modelo seleção de variantes foi aplicado às amostras submetidas a compressão para análise das diferentes variantes formadas nos dois tipos possíveis de martensita. Inicialmente, foram analisadas as ligas que continham martensita  $\varepsilon$ . A Figura 55 mostra o resultado da análise de seleção de variantes para a Liga 2, que possui martensita  $\varepsilon$ .

A Figura 55a mostra a martensita  $\varepsilon$  em vermelho e o mapa dos ângulos de Euler da austenita, além dos respectivos locais em que foram feitos cortes para análise de orientação. Um cuidado necessário para esta análise é que o corte precisa estar em uma mesma região da austenita-mãe. Além disso, precisa ter todas as orientações da martensita  $\varepsilon$ , que pode ser observada na Figura 55b. Então, três grãos distintos foram analisados de forma experimental e através do programa de seleção de variantes.

Figura 55 – Análise da seleção de variantes na liga 2 nos grãos marcados: a) Martensita  $\epsilon$  em vermelho e mapa de ângulos de Euler da austenita, b) Austenita em amarelo e mapa de ângulos de Euler da martensita  $\epsilon$ ; figuras de polos para  $\{0002\}$  e  $\{10\bar{1}0\}$  no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado, e) grão 2, experimental, f) grão 2, simulado, g) grão 3, experimental, h) grão 3, simulado.



Fonte: autoria própria

Para cada grão, a orientação da austenita mãe foi medida experimentalmente em regiões com MAD próximo à 0,5 e os resultados estão na Tabela 12. A tensão uniaxial elástica macroscópica foi de -50MPa. Os polos basal  $\{0001\}$  e prismático  $\{10\bar{1}0\}$  da martensita  $\epsilon$  foram plotados por serem planos de deslizamento de grande importância.

Tabela 12 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita na liga 2 medida em cada grão

	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
Grão 1	134,4	137,5	207,9
Grão 2	67	159,3	201,3
Grão 3	181,9	139	189,8

Fonte: autoria própria

As variantes foram classificadas e apenas as selecionadas estão mostradas na Tabela 13. Todos os resultados estão mostrados no apêndice B para fins de consulta e comparação. Pela análise das figuras de polos apresentadas (Figura 55c-h), o programa de seleção de variantes da martensita  $\epsilon$  para a liga 2 conseguiu prever todas as variantes para os grãos analisados.

Tabela 13 – Variantes selecionadas pela simulação e suas respectivas orientações

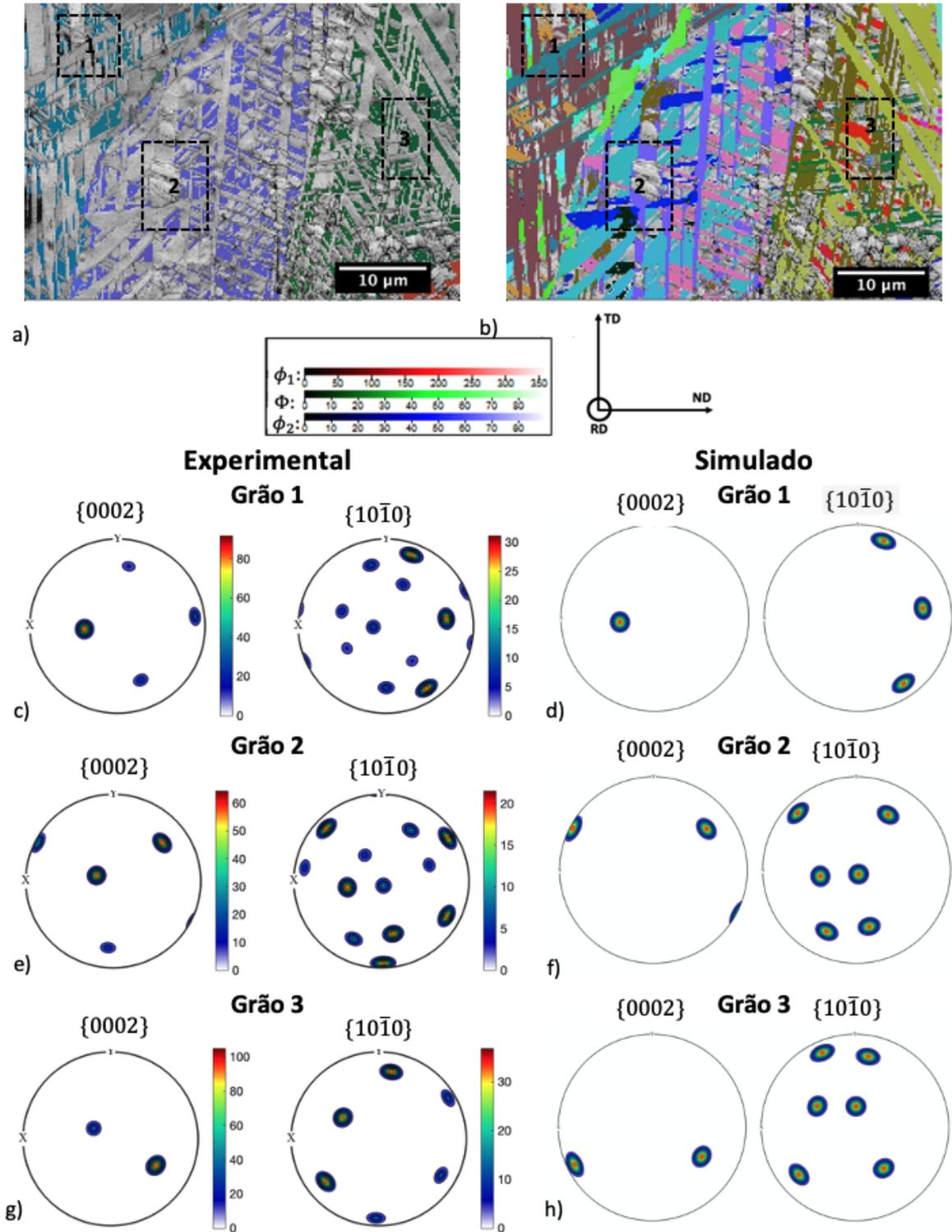
Grão	Variante Selecionada	Energia Calculada (J/mol)	Ângulos de Euler		
			$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
Grão 1	V3	2,68	78.83	106.72	254.97
	V4	2,92	325.69	97.89	39.08
Grão 2	V1	2,54	275.53	143.55	223.83
	V2	4,36	269.88	138.12	276.58
Grão 3	V3	4,30	139.63	97.29	2.72

Fonte: autoria própria

A análise da seleção de variantes para martensita  $\epsilon$  da liga 3 está mostrada na Figura 56. Como esta liga possui os dois tipos de martensita, optou-se por mostrar o mapa dos ângulos de Euler para cada fase analisada e o contraste de banda para o resto das fases.

A Figura 56a mostra o mapa de orientação da austenita e o contraste de banda de todas as fases. A partir dela, pode-se notar que existem quatro orientações distintas da austenita mãe, ou seja, quatro diferentes grãos nesse mapa. Três desses quatro grãos foram escolhidos para análise e estão devidamente marcados. A Figura 56b mostra o mapa de orientação da martensita  $\epsilon$  e o contraste de banda para todas as fases.

Figura 56 – Análise da seleção de variantes na liga 3 nos grãos marcados: a) Mapa de ângulos de Euler da austenita e contraste de banda, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita  $\epsilon$  e contraste de banda; figuras de polos para  $\{0002\}$  e  $\{10\bar{1}0\}$  no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado, e) grão 2, experimental, f) grão 2, simulado, g) grão 3, experimental, h) grão 3, simulado.



Fonte: autoria própria

Novamente, a tensão uniaxial macroscópica utilizada como valor de entrada no programa foi de -50MPa e as orientações da austenita-mãe estão presentes na Tabela 14.

Tabela 14 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita na liga 3 medida em cada grão

	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
Grão 1	80	156	222,9
Grão 2	120,6	141,4	228,8
Grão 3	46,1	133,2	202,8

Fonte: autoria própria

As Figuras 56c-h mostram as figuras de polos analisadas na liga 3, com os resultados experimentais e simulados. Para esta liga, a simulação apresentou menos variantes do que a amostra submetida ao ensaio. Entretanto, a simulação leva em conta apenas a tensão uniaxial imposta no ensaio e existem outras formas de seleção de variantes que aqui podem ter interferido. Essa amostra, então, pode ter um nível maior de tensão residual devido ao gradiente térmico imposto durante o resfriamento e, assim, novas variantes foram formadas.

Kundu e Bhadeshia (2007) analisando transformações do tipo  $\gamma \rightarrow \alpha'$  descobriram que a seleção de variantes é melhor prevista através de um modelo direto do que o modelo de Humbert *et al.* (2007) que considera fatores de severidade durante a transformação em dois passos do tipo  $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ . O fator de severidade utilizado (0,9) também pode ter interferido no resultado da seleção de variantes escolhidas.

Porém, as variantes com mais alta intensidade nas figuras experimentais conseguiram ser previstas pela simulação. Portanto, é de se concluir que o mecanismo de maior importância na seleção de variantes desta liga realmente foi a tensão imposta durante o ensaio. As variantes selecionadas estão mostradas na Tabela 15.

Tabela 15 – Variantes selecionadas para liga 3 e martensita  $\varepsilon$  e suas respectivas orientações

Grão	Variante Selecionada	Energia Calculada (J/mol)	Ângulos de Euler		
			$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
Grão 1	V1	2,45	263.35	149.24	211.67
	V3	3,19	51.92	119.01	15.38
Grão 2	V4	3,02	297.49	93.27	147.63
	V2	3,22	120.6	128.32	270.65
Grão 3	V4	3,05	244.3	98.97	166.19

Fonte: autoria própria

A martensita  $\varepsilon$  esteve presente nas ligas 2 e 3, como analisado. Já a martensita  $\alpha'$

esteve presente nas ligas 3 e 4 e foi analisada pelo modelo de Patel-Cohen. Inicialmente, o programa matrixJ foi utilizado para calcular os parâmetros de transformação de fase (Tabela 16). Os parâmetros de rede utilizados foram  $a_\gamma = 3,6599 \text{ \AA}$  e  $a_\alpha = 2,866 \text{ \AA}$ .

Tabela 16 – Parâmetros calculados para transformação  $\gamma \leftrightarrow \alpha'$

Plano de hábito ( <b>p</b> )	(0,12979921 -0,69089855 -0,71120416)
Vetor direção de deformação ( <b>d</b> )	(0,14374542 -0,59916055 0,78761912)
Matriz de transformação ( $\alpha'J\gamma$ )	$\begin{pmatrix} 0.91736063 & -0.88829352 & 0.01136387 \\ 0.87845496 & 0.90461838 & -0.20181058 \\ 0.13233065 & 0.15279152 & 1.26090777 \end{pmatrix}$
Componente de deformação de deformação de dilatação ( $\delta$ )	-0,03960278
Componente de deformação de cisalhamento ( <b>s</b> )	0,23693830

Fonte: autoria própria

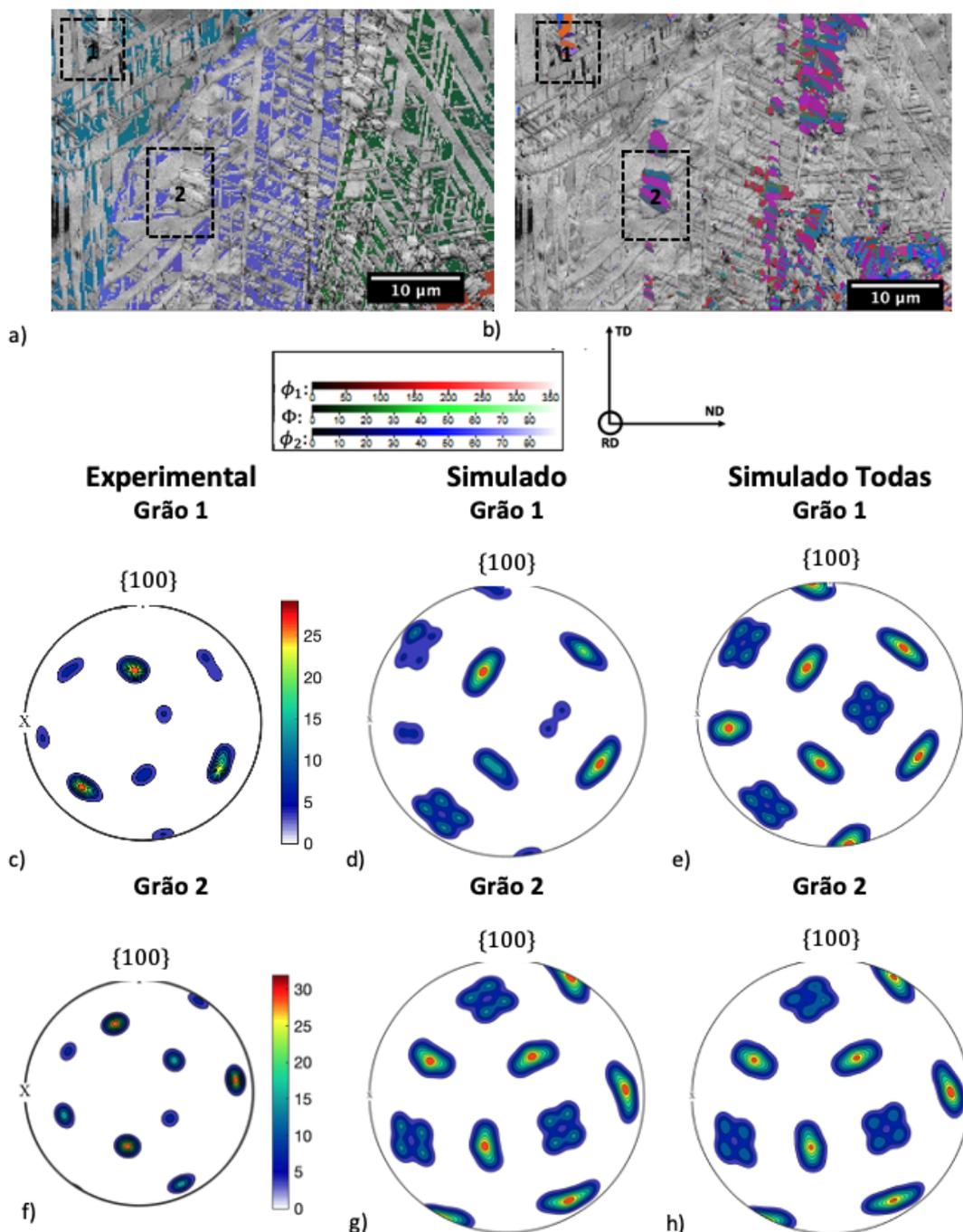
A análise de seleção de variantes para a martensita  $\alpha'$  na liga 3 está mostrada na Figura 57. A orientação da austenita foi a mesma (Tabela 14), já que a região analisada também foi a mesma. O grão 3 não foi analisado pois não foi encontrada martensita  $\alpha'$  nessa região.

A Figura 57a mostra, novamente, o mapa de orientação da austenita-mãe e o contraste de banda e a Figura 57b mostra o contraste de banda e o mapa de orientação da martensita  $\alpha'$ . Para análise das variantes, a figura de polos (100) está mostrado para a análise experimental (Figura 57c, para grão 1 e Figura 57f, para grão 2), para a simulação com apenas as variantes selecionadas (Figura 57d, para grão 1 e Figura 57g, para grão2) e para a simulação com todas as variantes (Figura 57e, para grão 1 e Figura 57h, para grão 2).

Comparando as figuras de polos experimentais (Figura 57c e 57f) com suas respectivas figuras simuladas com todas as variantes (Figura 57e e 57h), pode-se notar que a simulação fez corretamente a localização das variantes que aparecem no experimental, ou seja, todas possuem um local correto na simulação.

A partir dessa análise, a simulação da seleção de variantes pôde ser realizada. Comparando as figuras de polos experimentais com suas respectivas simulações de seleção de variantes, pode-se perceber que todas as variantes presentes no experimental estão presentes na simulação. Na simulação existem variantes extras, que não aparecem no experimental. Esse problema também foi reportado por outros autores (VIANA, 2014; KUNDU, 2007; BÉREŠ *et al.*, 2015), inclusive Viana (2014), que utilizou uma metodologia parecida com a aplicado nesta tese, compreende que a divergência pode ser causada por tensões térmicas impostas durante o resfriamento ao ar do material, ocasionando um novo método de seleção de variantes.

Figura 57 – Análise da seleção de variantes na liga 3 nos grãos marcados: a) Mapa de ângulos de Euler da austenita e contraste de banda, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita  $\alpha$  e contraste de banda; figuras de polos para  $\{100\}$  no c) grão 1, experimental, d) grão 1, simulado com apenas as variantes positivas, e) grão 1, simulado com todas as variantes, f) grão 2, experimental, g) grão 2, simulado com apenas as variantes positivas, h) grão 2, simulado com todas as variantes.

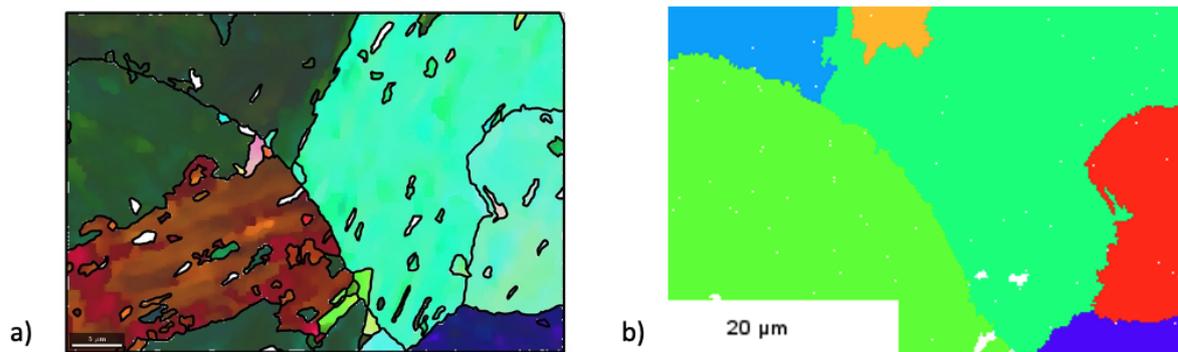


Fonte: autoria própria

A liga 4, após o ensaio de compressão, mostrou uma microestrutura inteiramente formada de martensita  $\alpha'$ , como visto anteriormente. Portanto, uma reconstrução da austenita-mãe foi necessária. Essa reconstrução foi realizada pelo programa ARPGE e por um script

escrito em Matlab para Mtex disponível em código aberto e baseado nos estudos de Nyysönen *et al.* (2018) . Os resultados de reconstrução da austenita estão mostrados na Figura 58.

Figura 58 – Reconstrução da austenita-mãe para a liga 4 feita pelos programas: a) Matlab em Mtex e b) ARPGE



Fonte: autoria própria

Os dois modelos utilizados para a reconstrução da austenita-mãe mostraram resultados próximos em relação aos grãos reconstruídos. A análise de seleção de variantes foi realizada, então, com os ângulos medidos a partir dessas duas reconstruções e não obteve-se resultados significativamente diferentes. Portanto, optou-se por continuar a análise apenas com a reconstrução realizada em Matlab. Os parâmetros para simulação da seleção de variantes foram os já mostrados na Tabela 16. Para a análise de seleção de variantes, dois grãos foram escolhidos e suas orientações estão na Tabela 17. A tensão uniaxial aplicada foi de -50 MPa.

Tabela 17 – Orientação (ângulos de Euler) da austenita-mãe reconstruída na liga 4 medida em cada grão

	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
Grão 1	240,7	36,7	193,4
Grão 2	105,9	137,9	16,7

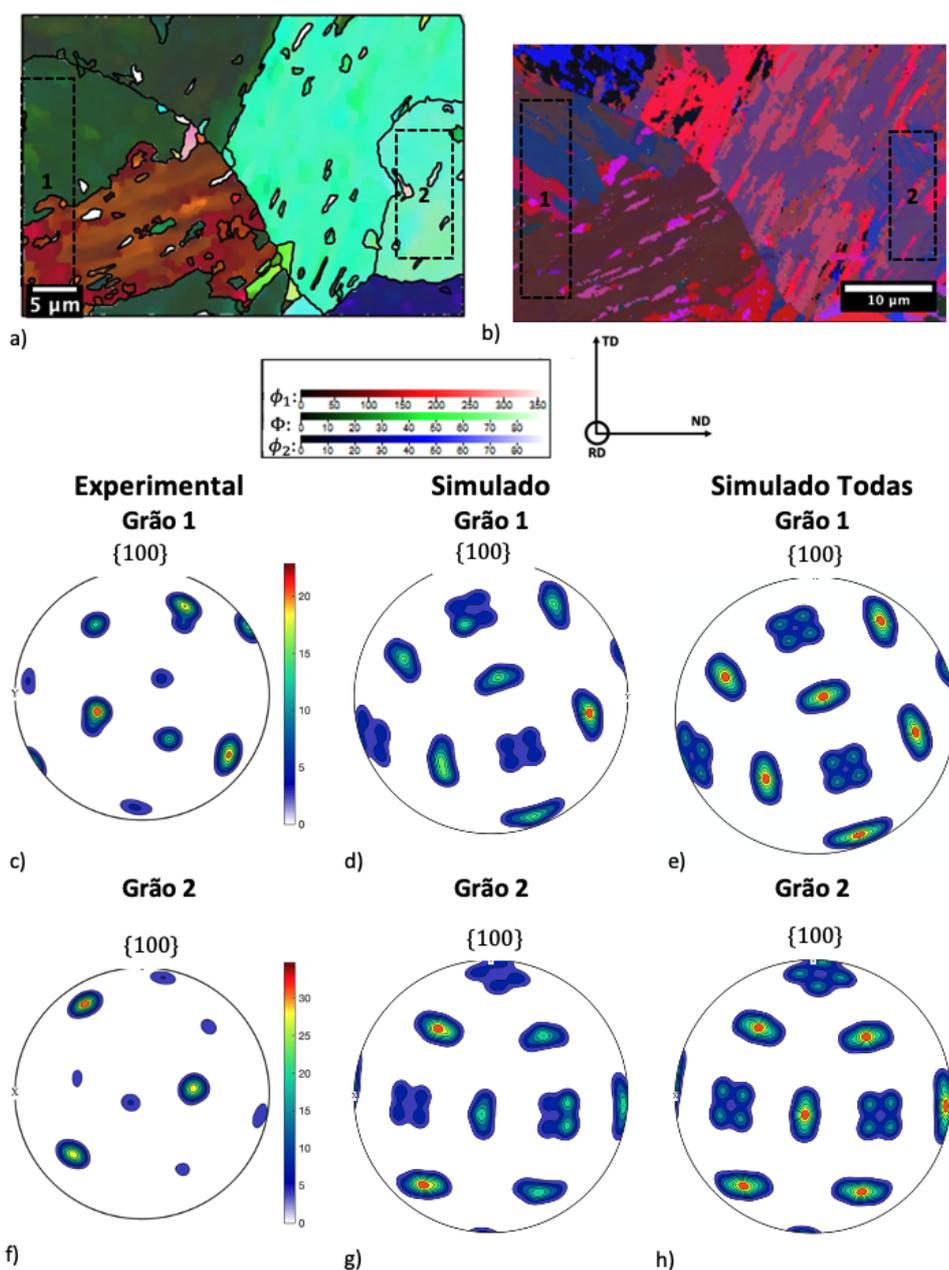
Fonte: autoria própria

Os resultados de seleção de variantes estão na Figura 59. A Figura 59a mostra o mapa de orientação da austenita-mãe reconstruído e a Figura 59b mostra o mapa de orientação da martensita  $\alpha'$ . Para análise da variantes, a figura de polos (100) está mostrado para a análise experimental (Figura 59c, para grão 1 e Figura 59f, para grão 2), para a simulação com apenas as variantes selecionadas (Figura 59d, para grão 1 e Figura 59g, para grão 2) e para a simulação com todas as variantes (Figura 59e, para grão 1 e Figura 59h, para grão 2).

A figura de polos simulada para todas as variantes nos dois grãos (Figura 59e e Figura 59h) coincidiu com as respectivas figuras experimentais (Figura 59c e Figura 59d,

respectivamente). Além disso, a simulação com as variantes positivas conseguiu prever todas as variantes que apareceram no experimental, porém com um desvio de alguns graus entre elas. Aqui, pode-se entender que existe uma diferença entre a reconstrução aplicada, no modelo de reconstrução da austenita-mãe, e os resultados experimentais. Novamente, existiu uma diferença na figura simulada por aparecer mais variantes do que a experimental.

Figura 59 – Análise da seleção de variantes na liga 4 nos grãos marcados: a) Mapa de reconstrução da austenita-mãe realizada em Mtex, b) Mapa de ângulos de Euler da martensita  $\alpha$ ; figuras de polos para (100) no grão 1 para c) experimental, d) simulado com apenas as variantes positivas, e) simulado com todas as variantes; e grão 2 para f) experimental, g) simulado com apenas as variantes positivas, h) simulado com todas as variantes.



Fonte: autoria própria

## 6 CONCLUSÃO

A metodologia utilizada para os ensaios de compressão foi desenvolvida com base nos ensaios de dilatométrica e nos cálculos de EFE e  $M_i$ , que permitiu prever em quais temperaturas ocorreriam as transformações;

Devido a  $M_i$  negativa apresentada na liga 1 e a uma mudança sutil na curva de resfriamento da dilatométrica, a qual está associada à transição magnética da austenita, foi possível concluir que a martensita  $\varepsilon$ , presente na liga 1 na amostra como recebida, foi induzida por deformação;

Após o ensaio de compressão à quente na região elástica, a liga 1 não apresentou nenhuma transformação martensítica nem formação de maclas. Portanto, a compressão aplicada não foi suficiente para induzir a formação de martensita ou maclagem;

A liga 2 apresentou  $M_i$  positiva para a martensita  $\varepsilon$  e  $M_i$  negativa para a martensita  $\alpha'$ , indicando um favorecimento para o aparecimento de martensita  $\varepsilon$  durante resfriamento até temperatura ambiente (27 °C). O ensaio de dilatométrica e a análise microestrutural da amostra após compressão, que apresentou uma microestrutura mista de martensita  $\varepsilon$  e austenita, confirmaram esse resultado;

Com a análise de gradiente de orientação, foi possível mostrar porque alguns grãos apresentaram apenas nucleação e não o crescimento da placa de martensita. Na liga 2 foi observado que os grãos com alto gradiente próximo aos contornos não favoreceram o crescimento da martensita  $\varepsilon$ . A liga 3 foi analisada e apresentou em média um baixo gradiente por toda a região analisada, explicando assim o maior crescimento das placas por todos os grãos;

A liga 3 apresentou  $M_i$  positiva para os dois tipos de martensita,  $\alpha'$  e  $\varepsilon$ , e após o ensaio de compressão a liga apresentou uma estrutura formada por 3 fases, austenita, martensita  $\varepsilon$  e martensita  $\alpha'$ ;

As martensitas  $\varepsilon$  apresentaram morfologias em placas e, observando esta característica, foi feita uma simulação do traço de deslizamento da austenita. Pôde-se perceber que as placas de martensita  $\varepsilon$  tendem a crescer orientadas;

A liga 4 apresentou o maior valor de  $M_i$  de todas as ligas possibilitando a formação de uma estrutura inteiramente composta por martensita  $\alpha'$  à temperatura ambiente (27 °C);

Em relação às relações de orientação, as martensitas encontradas seguiram relações já evidenciadas na literatura. A relação Kurdjumov-Sachs foi encontrada para descrever a orientação entre austenita e martensita  $\alpha'$ , relação Shoji-Nishiyama para descrever a orienta-

ção entre austenita e martensita  $\varepsilon$  e a relação de Burgers entre martensita  $\varepsilon$  e martensita  $\alpha'$ . De forma geral, as relações de orientação seguiram as relações:  $\{111\}_\gamma || \{110\}_\alpha || \{0001\}_\varepsilon$  e  $\langle 110 \rangle_\gamma || \langle 111 \rangle_\alpha || \langle 2\bar{1}10 \rangle_\varepsilon$ ;

Os programas desenvolvidos conseguiram calcular todas variantes da martensita  $\alpha'$  e  $\varepsilon$  nas posições corretas, resultado comprovado pelas figuras de polos experimentais;

Os programas para o cálculo e seleção das variantes da martensita  $\alpha'$  foram reescritos e corrigidos em Python, com o objetivo de atualizar a linguagem. O erro encontrado e corrigido teve relação com o cálculo das matrizes de transformação para martensita  $\alpha'$ , o qual poderia selecionar variantes erradas;

O programa de seleção de variantes da martensita  $\alpha'$  foi comparada com artigos na literatura que utilizaram o programa antigo e a correção mostrou-se satisfatória, visto a melhoria nos resultados;

O programa desenvolvido para a o cálculo e seleção de variantes da martensita  $\varepsilon$  foi feito em linguagem Python e baseado no modelo de Humbert. Os programas previram de forma satisfatória as variantes encontradas nas ligas 2 e 3;

Para a liga 2, todas as variantes encontradas na amostra experimental foram previstas pelos programas aqui desenvolvidos, apresentando resultados idênticos;

As variantes de maiores intensidades da martensita  $\varepsilon$  para ligas 2 e 3 foram previstas com eficácia pelos programas. O resultado experimental apresentou algumas variantes de menor intensidade na liga 3, a qual acredita-se que outros fatores podem ter favorecido o aparecimento de variantes, como tensões impostas durante o ciclo de resfriamento. Além disso, existe uma necessidade na análise e questionamento no fator de severidade de 0,9 utilizado na literatura, já que este fator pode delimitar a escolha das variantes selecionadas. Para isso, é necessário um estudo com uma quantidade maior de grãos analisados;

As simulações de Patel-Cohen para martensita  $\alpha'$  previram as variantes de alta intensidade e as posições de todas as variantes vistas nas figuras de polos experimentais, resultando em uma boa previsão. A tensão adotada neste trabalho foi abaixo do limite de escoamento do material, região onde o critério de Patel-Cohen foi proposto. Por conta disso, os resultados foram próximos aos encontrados experimentalmente.

## 7 SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Compreendendo que o trabalho aqui desenvolvido não é finito, algumas sugestões podem ainda ser estudadas, melhoradas e aprofundadas:

- Melhorar a interface dos programas aqui estudados e aplicar em uma maior quantidade de grãos;
- Analisar a interação das parciais de Shockley desenvolvidas a partir da discordância perfeita e estudar se existe uma possível novo método de simular a seleção de variantes para martensita  $\epsilon$ , através da diferença de fatores de Schmid das parciais de Shockley ;
- Analisar a influência da mudança do parâmetro de rede da austenita nas deformações calculadas pelos programas de seleção de variantes para martensita  $\alpha'$  e, conseqüentemente, a variação das variantes escolhidas;
- Estudar a relação entre as tensões térmicas durante o resfriamento ao ar das ligas de Fe-Mn com a seleção de variantes

## REFERÊNCIAS

ANDRÉS, C. García de; CABALLERO, F.; CAPDEVILA, C.; ÁLVAREZ, L. Application of dilatometric analysis to the study of solid–solid phase transformations in steels. **Materials Characterization**, v. 48, p. 101–111, 02 2002.

AVERBACH, B.; COHEN, M.; FLETCHER, S. The dimensional stability of steel. 3. decomposition of martensite and austenite at room temperature. **TRANSACTIONS OF THE AMERICAN SOCIETY FOR METALS, METALLURGICAL SOC AMER INST MINING METALL PETROL ENG INC 420 COMMONWEALTH DR . . .**, v. 40, p. 728–757, 1948.

BAEK, M.-S.; KIM, K.-S.; PARK, T.-W.; HAM, J.; LEE, K.-A. Quantitative phase analysis of martensite-bainite steel using ebsd and its microstructure, tensile and high-cycle fatigue behaviors. **Materials Science and Engineering: A**, v. 785, p. 139375, 2020. ISSN 0921-5093. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509320304561>>.

BEHJATI, P.; NAJAFIZADEH, A. Role of chemical driving force in martensitic transformations of high-purity fe-cr-ni alloys. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 42, n. 12, p. 3752, Jul 2011. ISSN 1543-1940. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-011-0769-x>>.

BHADESHIA, H. **Worked examples in the geometry of crystals**. Institute of Materials, 1987. (Book (The Institute of Metals)). ISBN 9780904357943. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=LzpRAAAAMAAJ>>.

BHADESHIA, H. K. D. H. **Worked Examples in the Geometry of Crystals**. [S.l.: s.n.], 2006.

BISHOP, J.; HILL, R. Cxxviii. a theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face-centred metal. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor Francis, v. 42, n. 334, p. 1298–1307, 1951. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786444108561385>>.

BORGENSTAM, A.; HILLERT, M.; ÅGREN, J. Critical temperature for growth of martensite. **Acta Metallurgica et Materialia**, v. 43, n. 3, p. 945 – 954, 1995. ISSN 0956-7151. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0956715194003115>>.

BOUAZIZ, O.; ALLAIN, S.; SCOTT, C.; CUGY, P.; BARBIER, D. High manganese austenitic twinning induced plasticity steels: A review of the microstructure properties relationships. **Current Opinion in Solid State and Materials Science**, v. 15, n. 4, p. 141 – 168, 2011. ISSN 1359-0286. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359028611000179>>.

BOWEN, A. W. Texture development in high strength aluminium alloys. **Materials Science and Technology**, Taylor Francis, v. 6, n. 11, p. 1058–1071, 1990. Disponível em: <<https://doi.org/10.1179/mst.1990.6.11.1058>>.

BRACKE, L.; KESTENS, L.; PENNING, J. Transformation mechanism of  $\gamma$ -martensite in an austenitic fe–mn–c–n alloy. **Scripta Materialia**, v. 57, n. 5, p. 385 – 388, 2007. ISSN 1359-6462. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359646207003557>>.

BUNGE, H. **Texture Analysis in Materials Science: Mathematical Methods**. Elsevier Science, 1982. ISBN 9781483278391. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=wAQcBQAAQBAJ>>.

BUNGE, H.-J. Expansion of orientation distribution functions in series of generalized spherical harmonics: Three-dimensional textures. In: BUNGE, H.-J. (Ed.). **Texture Analysis in Materials Science**. Butterworth-Heinemann, 1982. p. 47 – 118. ISBN 978-0-408-10642-9. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978040810642950009X>>.

BUTRÓN-GUILLÉN, M. P.; VIANA, C. S. D. C.; JONAS, J. J. A variant selection model for predicting the transformation texture of deformed austenite. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 28, n. 9, p. 1755–1768, Sep 1997. ISSN 1543-1940. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-997-0107-5>>.

BYUN, T.; HASHIMOTO, N.; FARRELL, K. Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behaviors in austenitic stainless steels. **Acta Materialia**, v. 52, n. 13, p. 3889 – 3899, 2004. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645404002654>>.

BÉREŠ, M.; ABREU, H. F. G.; SANTOS, L. P. M.; DAVIES, C. M.; DYE, D. Effect of variant transformations in fusion zones of gas metal arc welds. **Science and Technology of Welding and Joining**, Taylor Francis, v. 20, n. 4, p. 353–360, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1179/1362171815Y.0000000025>>.

CAI, W.; BULATOV, V.; CHANG, J.; LI, J.; YIP, S.; CHANG, J.-P. Dislocation core effects on mobility. **ISBN 044451483X**, v. 12, p. 1–80, 01 2004.

CALCAGNOTTO, M.; ADACHI, Y.; PONGE, D.; RAABE, D. Deformation and fracture mechanisms in fine- and ultrafine-grained ferrite/martensite dual-phase steels and the effect of aging. **Acta Materialia**, v. 59, n. 2, p. 658 – 670, 2011. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645410006488>>.

CAYRON, C. Arpegge: A computer program to automatically reconstruct the parent grains from electron backscatter diffraction data. **Journal of applied crystallography**, v. 40, p. 1183–1188, 01 2008.

CHARLES, A. B. J.; LUTTS, A. High manganese - aluminum austenitic steels for cryogenic applications, some mechanical and physical properties. **J. Phys. Colloques**, v. 45, p. C1–619 – C1–623, 1984. Disponível em: <<https://jphyscol.journaldephysique.org/articles/jphyscol/abs/1984/01/jphyscol198445C1126/jphyscol198445C1126.html>>.

CHARLES, J.; BERZHEGAN, A.; LUTTS, A.; DANCOISNE, P. New cryogenic materials – fe-mn-al alloys. **Metal progress**, v. 119, n. 6, p. 71 – 74, 1981.

CHOI, S.-M.; HONG, J.-S.; NAM, J.-H.; CHO, W.; SUH, D.-W.; LEE, Y.-K. Effect of the magnetic transition of austenite phase on austenite-to-epsilon martensitic transformation in fe-mn binary alloys. **Materials Characterization**, v. 163, p. 110279, 2020. ISSN 1044-5803. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1044580319332838>>.

COTES, S.; GUILLERMET, A.; SADE, M. Phase stability and fcc/hcp martensitic transformation in fe–mn–si alloys: Part i. experimental study and systematics of the ms and as temperatures. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 278, n. 1, p. 231 – 238, 1998. ISSN 0925-8388. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838898005805>>.

CURTZE, S.; KUOKKALA, V.-T. Dependence of tensile deformation behavior of twip steels on stacking fault energy, temperature and strain rate. **Acta Materialia**, v. 58, n. 15, p. 5129 – 5141,

2010. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645410003344>>.

DAFÉ, S. S. F. d.; SICUPIRA, F. L.; MATOS, F. C. S.; CRUZ, N. S.; MOREIRA, D. R.; SANTOS, D. B. Effect of cooling rate on ( $\epsilon$ ,  $\alpha'$ ) martensite formation in twinning/transformation-induced plasticity Fe-17Mn-0.06C steel. **Materials Research**, scielo, v. 16, p. 1229 – 1236, 12 2013. ISSN 1516-1439. Disponível em: <[https://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1516-14392013000600003](https://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1516-14392013000600003)>.

DOEPKEN, H. C. Tensile properties of wrought austenitic manganese steel in the temperature range from + 100°C to –196°C. **JOM**, v. 4, n. 2, p. 166–170, 1952. ISSN 1543-1851. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF03397666>>.

ENGLER, O.; RANDLE, V. **Introduction to Texture Analysis: Macrotexture, Microtexture, and Orientation Mapping, Second Edition**. CRC Press, 2009. ISBN 9781420063660. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=mpLq\\\_0Bkn6cC](https://books.google.com.br/books?id=mpLq\_0Bkn6cC)>.

ESKANDARI, M.; BONAB, M. A. M.; HANZAKI, A. Z.; FATEMI, S. M. Effect of hot deformation on texture and microstructure in Fe-Mn austenitic steel during compression loading. **Journal of Materials Engineering and Performance**, 03 2018.

ESKANDARI, M.; MOHTADI-BONAB, M. A.; ZAREI-HANZAKI, A.; SZPUNAR, J. A.; KARJALAINEN, L. P. Ebsd study of deformation microstructure of an as-homogenized austenitic Mn steel after hot compression. **Advanced Engineering Materials**, v. 20, n. 10, p. 1800327, 2018. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adem.201800327>>.

ESKANDARI, M.; ZAREI-HAZANKI, A.; MOHTADI-BONAB, M.; ODESHI, A.; SZPUNAR, J. Microstructure and texture evolution in 21Mn–2.5Si–1.6Al–Ti steel subjected to dynamic impact loading. **Materials Science and Engineering: A**, v. 622, p. 160 – 167, 2015. ISSN 0921-5093. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509314013653>>.

GONG, Y. F.; COOMAN, B. C. D. Selective oxidation and sub-surface phase transformation of twip steel during continuous annealing. **steel research international**, v. 82, n. 11, p. 1310–1318, 2011. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/srin.201100122>>.

HADFIELD, R. Hadfield's manganese steel. **Science**, v. 12, p. 284–286, 1888. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/ns-12/306/284.2>>.

HALL, J. Studies of hadfield's manganese steel with the high-power microscope. **Trans. AIME**, v. 84, p. 382–427, 1929.

HAMADA, A. S.; SAHU, P.; CHOWDHURY, S. G.; KARJALAINEN, L. P.; LEVOSKA, J.; OITTINEN, T. Kinetics of the  $\gamma \rightarrow \epsilon$  Martensitic Transformation in Fine-Grained Fe-26Mn-0.14C Austenitic Steel. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 39, n. 2, p. 462–465, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-007-9424-y>>.

HANSEN, J.; POSPIECH, J.; LÜCKE, K. **Tables for Texture Analysis of Cubic Crystals**. Springer Berlin Heidelberg, 1978. ISBN 9783540086895. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=4lurIAAACA>>.

HULL, D.; BACON, D. Chapter 3 - movement of dislocations. In: HULL, D.; BACON, D. (Ed.). **Introduction to Dislocations (Fifth Edition)**. Fifth edition. Oxford:

Butterworth-Heinemann, 2011. p. 43 – 62. ISBN 978-0-08-096672-4. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080966724000037>>.

HUMBERT, M.; PETIT, B.; BOLLE, B.; GEY, N. Analysis of the — variant selection induced by 10at 60°C. **Materials Science and Engineering: A**, v. 454-455, p. 508 – 517, 2007. ISSN 0921-5093. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509306025238>>.

HUMPHREYS, F.; HATHERLY, M. Chapter 3 - deformation textures. In: HUMPHREYS, F.; HATHERLY, M. (Ed.). **Recrystallization and Related Annealing Phenomena (Second Edition)**. Second edition. Oxford: Elsevier, 2004. p. 67 – 89. ISBN 978-0-08-044164-1. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080441641500074>>.

HUNG, C.-Y.; BAI, Y.; TSUJI, N.; MURAYAMA, M. Grain size altering yielding mechanisms in ultrafine grained high-mn austenitic steel: Advanced tem investigations. **Acta Materialia**, 2020. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3681163>>.

KARAMAN, I.; SEHITOGLU, H.; GALL, K.; CHUMLYAKOV, Y.; MAIER, H. Deformation of single crystal hadfield steel by twinning and slip. **Acta Materialia**, v. 48, n. 6, p. 1345 – 1359, 2000. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645499003833>>.

KIM, J.-S.; JEON, J. B.; JUNG, J. E.; UM, K.-K.; CHANG, Y. W. Effect of deformation induced transformation of -martensite on ductility enhancement in a fe-12 mn steel at cryogenic temperatures. **Metals and Materials International**, v. 20, p. 41–47, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s12540-014-1010-4>>.

KITAHARA, H.; UEJI, R.; TSUJI, N.; MINAMINO, Y. Crystallographic features of lath martensite in low-carbon steel. **Acta Materialia**, v. 54, n. 5, p. 1279 – 1288, 2006. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645405006701>>.

KRIVOBOK, V. A study of the constitution of high manganese steels. **Trans. ASST**, v. 15, p. 893–956, 1929.

KUNDU, S. **Transformation strain and crystallographic texture in steels**. Tese (Doutorado) — University of Cambridge, 2007.

KUNDU, S.; BHADESHIA, H. Crystallographic texture and intervening transformations. **Scripta Materialia**, v. 57, n. 9, p. 869 – 872, 2007. ISSN 1359-6462. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359646207004940>>.

KURDJUMOW, G.; SACHS, G. Über den mechanismus der stahlhärtung. **Zeitschrift für Physik**, v. 64, n. 5, p. 325–343, May 1930. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01397346>>.

LECROISEY, F.; PINEAU, A. Martensitic transformations induced by plastic deformation in the fe-ni-cr-c system. **Metallurgical and Materials Transactions B**, v. 3, n. 2, p. 391–400, Feb 1972. ISSN 1543-1916. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02642042>>.

LEEM, D.-S.; LEE, Y.-D.; JUN, J.-H.; CHOI, C.-S. Amount of retained austenite at room temperature after reverse transformation of martensite to austenite in an fe-13**Scripta Materialia**, v. 45, n. 7, p. 767 – 772, 2001. ISSN 1359-6462. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359646201010934>>.

- Lü, Y.; HUTCHINSON, B.; MOLODOV, D. A.; GOTTSTEIN, G. Effect of deformation and annealing on the formation and reversion of  $\alpha$ -martensite in an Fe–Mn–C alloy. **Acta Materialia**, v. 58, n. 8, p. 3079 – 3090, 2010. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645410000753>>.
- MAHIEU, J.; COOMAN, B. C. D.; MAKI, J. Phase transformation and mechanical properties of Si-free bainite transformation-induced plasticity-aided steel. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 33, n. 8, p. 2573 – 2580, 2002. ISSN 1543-1940. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007/s11661-002-0378-9>>.
- MAKI, T. Microstructure and mechanical behaviour of ferrous martensite. **Materials Science Forum**, v. 56-58, p. 157–168, 1990.
- MARECHAL, D. **Linkage between mechanical properties and phase transformations in a 301LN austenitic stainless steel**. Tese (Doutorado), 04 2011.
- MCGRATH, M. C.; AKEN, D. C. V.; MEDVEDEVA, N. I.; MEDVEDEVA, J. E. Work hardening behavior in steel with multiple TRIP mechanisms. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 44, n. 10, p. 4634–4643, Oct 2013. ISSN 1543-1940. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-013-1820-x>>.
- MORITO, S.; HUANG, X.; FURUHARA, T.; MAKI, T.; HANSEN, N. The morphology and crystallography of lath martensite in alloy steels. **Acta Materialia**, v. 54, n. 19, p. 5323 – 5331, 2006. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645406005076>>.
- MORITO, S.; TANAKA, H.; KONISHI, R.; FURUHARA, T.; MAKI, T. The morphology and crystallography of lath martensite in Fe–C alloys. **Acta Materialia**, v. 51, n. 6, p. 1789 – 1799, 2003. ISSN 1359-6454. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645402005773>>.
- NISHIYAMA, Z. Mechanism of transformation from face-centred to body-centred cubic lattice. **Sci Rep Tohoku Imp Univ**, v. 23, p. 637–664, 1934.
- NOLZE, G. Characterization of the fcc/bcc orientation relationship by EBSD using pole figures and variants. **Zeitschrift für Metallkunde**, v. 9, 2004.
- NYSSÖNEN, T.; PEURA, P.; KUOKKALA, V. T. Crystallography, morphology, and martensite transformation of prior austenite in intercritically annealed high-aluminum steel. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 49, n. sn, p. 6426–6441, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-018-4904-9>>.
- OLUGBADE, T. O. Stress corrosion cracking and precipitation strengthening mechanism in TRIP steels: progress and prospects. **Corrosion Reviews**, De Gruyter, Berlin, Boston, n. 0, 2020. Disponível em: <<https://www.degruyter.com/view/journals/corrrev/ahead-of-print/article-10.1515-corrrev-2020-0052/article-10.1515-corrrev-2020-0052.xml>>.
- OTTE, H. The formation of stacking faults in austenite and its relation to martensite. **Acta Metallurgica**, v. 5, n. 11, p. 614 – 627, 1957. ISSN 0001-6160. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001616057901086>>.

PATEL, J.; COHEN, M. Criterion for the action of applied stress in the martensitic transformation. **Acta Metallurgica**, v. 1, n. 5, p. 531 – 538, 1953. ISSN 0001-6160. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001616053900832>>.

PISARIK, S.; AKEN, D. Crystallographic orientation of the  $\gamma \rightarrow \alpha'$  martensitic (athermal) transformation in a ferritic steel. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 45, 07 2014.

PRAMANIK, S.; GAZDER, A. A.; SALEH, A. A.; PERELOMA, E. V. Nucleation, coarsening and deformation accommodation mechanisms of  $\alpha'$ -martensite in a high manganese steel. **Materials Science and Engineering: A**, v. 731, p. 506 – 519, 2018. ISSN 0921-5093. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921509318308086>>.

RAGHAVAN, K. S.; SASTRI, A. S.; MARCINKOWSKI, M. J. Nature of the work-hardening behavior in hadfields manganese steel. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, v. 245, n. 1569, 1969.

RANDLE, V. Grain boundary geometry: Measurement. In: BUSCHOW, K. J.; CAHN, R. W.; FLEMINGS, M. C.; ILSCHNER, B.; KRAMER, E. J.; MAHAJAN, S.; VEYSSIERE, P. (Ed.). **Encyclopedia of Materials: Science and Technology**. Oxford: Elsevier, 2001. p. 3618 – 3622. ISBN 978-0-08-043152-9. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B0080431526006434>>.

RÉMY, L. The interaction between slip and twinning systems and the influence of twinning on the mechanical behavior of fcc metals and alloys. **Metallurgical Transactions A**, v. 12, n. 3, p. 387–408, Mar 1981. ISSN 1543-1940. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF02648536>>.

REMY, L.; PINEAU, A. Twinning and strain-induced f.c.c.  $\rightarrow$  h.c.p. transformation in the ferritic system. **Materials Science and Engineering**, v. 28, n. 1, p. 99 – 107, 1977. ISSN 0025-5416. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0025541677900933>>.

RIBAMAR, G. G.; ANDRADE, T. C.; MIRANDA, H. C. de; ABREU, H. F. G. de. Thermodynamic stacking fault energy, chemical composition, and microstructure relationship in high-manganese steels. **Metallurgical and Materials Transactions A**, v. 51, n. 9, p. 4812–4825, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11661-020-05877-z>>.

ROBERTS, W. Deformation twinning in hadfield steel. **Transactions of the Metallurgical Society of AIME**, v. 230, n. 372, 1964.

ROE, R. Description of crystallite orientation in polycrystalline materials iii: General solution to pole figure inversion. **Journal of Applied Physics**, v. 36, p. 2024, 1965.

SAHU, P.; HAMADA, A. S.; CHOWDHURY, S. G.; KARJALAINEN, L. P. Structure and microstructure evolution during martensitic transformation in wrought Fe–26Mn–0.14C austenitic steel: an effect of cooling rate. **Journal of Applied Crystallography**, v. 40, n. 2, p. 354–361, Apr 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1107/S0021889807005882>>.

SATO, K.; ICHINOSE, M.; HIROTSU, Y.; INOUE, Y. Effects of deformation induced phase transformation and twinning on the mechanical properties of austenitic Fe-Mn-Al alloys. **ISIJ International**, v. 29, n. 10, p. 868–877, 1989.

SCHMITT, J.-H.; IUNG, T. New developments of advanced high-strength steels for automotive applications. **Comptes Rendus Physique**, v. 19, n. 8, p. 641 – 656, 2018. ISSN 1631-0705. New trends in metallic alloys / Alliages métalliques : nouvelles tendances. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070518301166>>.

SCHUMANN, H. Verformungsinduzierte martensitbildung in metastabilen austenitischen stählen. **Kristall und Technik**, v. 10, n. 4, p. 401–411, 1972. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/crat.19750100409>>.

SHEN, Y.; LIU, J.; XU, H.; LIU, H. Micro-segregation study of directional solidified fe–mn–c–al twip steels. **Metallurgical and Materials Transactions B**, 2020. ISSN 1543-19166. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11663-020-01982-x>>.

TASAKI, W.; SAWAGUCHI, T.; TSUCHIYA, K. Ebsd analysis of dual / phase microstructures in tensile-deformed fe-mn-si shape memory alloy. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 797, p. 529 – 536, 2019. ISSN 0925-8388. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838819316135>>.

TAYLOR, G. Plastic strain in metals. **Journal of the Institute of Metals**, v. 62, p. 307–324, 1938.

TOFAUTE, W.; LINDEN, K. Transformations in solid state of manganese steels containing to 1.2% c and 17% mn. **Arch Eisenhüttenwese**, v. 10, p. 515–519, 1936.

TROIANO, A.; MCGUIRE, F. A study of the iron-rich iron-manganese alloys. **Transactions of the ASM**, v. 31, p. 346, 1943.

VIANA, N. F. **Efeito da deformação prévia na seleção de variantes na transformação martensítica no Aço Maraging 350**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, 2014.

VIANA, N. F.; NUNES, C. dos S.; de Abreu, H. F. G. The variant selection in the transformation from austenite to martensite in samples of maraging-350 steel. **Journal of Materials Research and Technology**, v. 2, n. 4, p. 298 – 302, 2013. ISSN 2238-7854. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S223878541300080X>>.

WANG, H.-Z.; YANG, P.; MAO, W.-M.; LU, F.-Y. Effect of hot deformation of austenite on martensitic transformation in high manganese steel. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 558, p. 26 – 33, 2013. ISSN 0925-8388. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838812022517>>.

YANG, H.-S.; JANG, J.; BHADESHIA, H.; SUH, D. Critical assessment: Martensite-start temperature for the  $\gamma \rightarrow \alpha$  transformation. **Calphad**, v. 36, p. 16 – 22, 2012. ISSN 0364-5916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0364591611001076>>.

ZHANG, P.; CHEN, Y.; XIAO, W.; PING, D.; ZHAO, X. Twin structure of the lath martensite in low carbon steel. **Progress in Natural Science: Materials International**, v. 26, n. 2, p. 169 – 172, 2016. ISSN 1002-0071. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1002007116300041>>.

**APÊNDICE A – MUDANÇA DE VOLUME NAS TRANSFORMAÇÕES DE FASES EM  
AÇOS COM TEOR DE MN**

Aços com teores de Mn podem possuir martensitas do tipo  $\alpha'$  (estrutura cristalina CCC) ou do tipo  $\varepsilon$  (estrutura cristalina HC). Considerando essas transformações oriundas da austenita (estrutura cristalina CFC), seguem os cálculos de mudança de volume. Para a transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$ :

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \alpha'} \% = \frac{V_{T\alpha'} - V_{T\gamma}}{V_{T\gamma}} \cdot 100 \quad (\text{A.1})$$

onde,

$\Delta V\%$ : variação de volume total, em porcentagem;

$V_{T\alpha'}$ : volume total de martensita  $\alpha'$ ;

$V_{T\gamma}$ : volume total de austenita  $\gamma$ .

Cada um desses volumes totais, então, é descrito como uma parcela do volume através da quantidade de átomos que cada célula cristalina consegue comportar.

$$V_{T\alpha'} = \frac{N}{2} \cdot V'_{\alpha'} \quad (\text{A.2})$$

onde,

$\frac{N}{2}$ : representa o número de átomos totais que estão presentes nas células CCC;

$V'_{\alpha'}$ : volume de martensita  $\alpha'$ ;

E para a austenita:

$$V_{T\gamma} = \frac{N}{4} \cdot V_{\gamma} \quad (\text{A.3})$$

onde,

$\frac{N}{4}$ : representa o número de átomos totais que estão presentes nas células CFC;

$V_{\gamma}$ : volume da austenita;

Considerando o volume da cada célula cúbica como sendo  $a_{\alpha'}^3$  e  $a_{\gamma}^3$  para martensita  $\alpha'$  e austenita, respectivamente, e que cada volume de célula pode ser calculado à partir dos raios dos átomos ( $R$ ), como:

$$a_{\alpha'}^3 = \left( \frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^3 \quad (\text{A.4})$$

$$a_{\gamma}^3 = (2R\sqrt{2})^3 \quad (\text{A.5})$$

Portanto, a equação A.1, por substituição, é transformada em:

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \alpha'} \% = \frac{\frac{N}{2} \cdot \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 - \frac{N}{4} \cdot (2R\sqrt{2})^3}{\frac{N}{4} \cdot (2R\sqrt{2})^3} \cdot 100 \quad (\text{A.6})$$

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \alpha'} \% = +8,87\% \quad (\text{A.7})$$

Portanto, na transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$  existe uma expansão. De forma contrária, na transformação  $\alpha' \rightarrow \gamma$  existe uma contração.

Agora, para a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$ , temos:

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \varepsilon} \% = \frac{V_{T\varepsilon} - V_{T\gamma}}{V_{T\gamma}} \cdot 100 \quad (\text{A.8})$$

onde,

$\Delta V_{\gamma \rightarrow \varepsilon} \%$ : variação de volume total, em porcentagem;

$V_{T\varepsilon}$ : volume total de martensita  $\varepsilon$ ;

$V_{T\gamma}$ : volume total de austenita  $\gamma$ .

Da mesma forma, cada um desses volumes totais, então, é descrito como uma parcela do volume através da quantidade de átomos que cada célula cristalina consegue comportar.

$$V_{T\gamma} = 4\sqrt{2}NR^3 \quad (\text{A.9})$$

$$V_{T\varepsilon} = \frac{N}{6} \cdot 12\sqrt{3}R^3 \cdot \frac{c}{a} \quad (\text{A.10})$$

Utilizando  $\frac{c}{a} = A$  e simplificando a equação A.10, temos:

$$V_{T\varepsilon} = 2\sqrt{3}NR^3A \quad (\text{A.11})$$

Substituindo na equação A.8, temos:

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \varepsilon} \% = \frac{2\sqrt{3}NR^3A - 4\sqrt{2}NR^3}{4\sqrt{2}NR^3} \quad (\text{A.12})$$

$$\Delta V_{\gamma \rightarrow \varepsilon} \% = \left( \frac{1\sqrt{3}\frac{c}{a}}{2\sqrt{2}} - 1 \right) \quad (\text{A.13})$$

Portanto, a variação de volume é dependente da relação  $\frac{c}{a}$  da martensita  $\varepsilon$  de acordo com as seguintes condições:

1. Quando  $\frac{c}{a} < 1,633$ , a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  ocorre com contração de volume;
2. Quando  $\frac{c}{a} = 1,633$ , a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  ocorre sem variação de volume;
3. Quando  $\frac{c}{a} > 1,633$ , a transformação  $\gamma \rightarrow \varepsilon$  ocorre com expansão de volume;

## APÊNDICE B – DADOS GERADOS PELOS PROGRAMAS DE SIMULAÇÃO DE SELEÇÃO DE VARIANTES

Os resultados gerados através dos programas utilizados, serão mostrados neste apêndice para possíveis comparações futuras.

Para liga 2 (20Mn-0,15C), os dados de entrada para simulação das variantes da martensita  $\epsilon$  foram  $\sigma = -50MPa$  e as orientações da austenita mãe:

- Grão 1, orientação [134, 4; 137, 5; 207, 9] $_{\gamma}$ ;
- Grão 2, orientação [67; 159, 3; 201, 3] $_{\gamma}$ ;
- Grão 3, orientação [181, 9; 139; 189, 8] $_{\gamma}$ ;

Os dados de orientação das variantes de martensita  $\epsilon$  estão mostrados na Tabela 18.

Para a liga 3 (11Mn-0,2C), os dados de entrada para simulação das variantes da martensita  $\epsilon$  foram  $\sigma = -50MPa$  e as orientações da austenita mãe:

- Grão 1, orientação [80; 156; 222, 9] $_{\gamma}$ ;
- Grão 2, orientação [120, 6; 141, 4; 228, 8] $_{\gamma}$ ;
- Grão 3, orientação [46, 1; 133, 2; 202, 8] $_{\gamma}$ ;

Os dados de orientação das variantes de martensita  $\epsilon$  estão mostrados na Tabela 19.

Para a Liga 3 com relação à formação de martensita  $\alpha'$ , os dados de orientação da austenita-mãe foram os mesmo utilizados para martensita  $\epsilon$ . Os dados gerados para todas as variantes estão na Tabela 20 para o grão 1 e Tabela 21 para o grão 2.

Para a Liga 4, os dados de entrada foram  $\sigma = -50MPa$  e as orientações da austenita-mãe, nesse caso reconstruída:

- Grão 1, orientação [240, 7; 36, 7; 193, 4] $_{\gamma}$ ;
- Grão 2, orientação [105, 9; 137, 9; 16, 7] $_{\gamma}$ ;

Os dados de orientação das variantes de martensita  $\alpha'$  estão mostrados na Tabela 22 para grão 1 e Tabela 23 para grão 2.

Tabela 18 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\epsilon$  simuladas na liga 2 e suas respectivas energias

Grão	Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
		$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
Grão 1	V1	2,01	165,46	248,49	0,03
		2,01	165,46	8,49	-0,08
		2,01	165,46	128,49	0,05
	V2	206,32	122,88	276,3	0,46
		206,32	122,88	156,3	2,38
		206,32	122,88	36,3	-2,85
	V3	78,83	106,72	14,97	-2,16
		78,83	106,72	254,97	2,68
		78,83	106,72	134,97	-0,52
	V4	325,69	97,89	159,08	-3,94
		325,69	97,89	39,08	2,92
		325,69	97,89	279,08	1,02
Grão 2	V1	<b>275,53</b>	143,55	223,83	2,54
		275,53	143,55	343,83	1,65
		275,53	143,55	103,83	-4,18
	V2	159,84	131	304,6	1,65
		159,84	131	184,6	-2,11
		159,84	131	64,6	0,46
	V3	6,36	115,09	350,94	-0,86
		6,36	115,09	230,94	0,59
		6,36	115,09	110,94	0,28
	V4	261,96	73,99	158,5	1,94
		261,96	73,99	38,5	0,51
		261,96	73,99	278,5	-2,45
Grão 3	V1	77,05	150,86	260,96	3,67
		77,05	150,86	20,96	-2,15
		77,05	150,86	140,96	-1,52
	V2	269,88	138,12	276,58	4,36
		269,88	138,12	156,58	-1,73
		269,88	138,12	36,58	-2,63
	V3	139,63	97,29	2,72	4,3
		139,63	97,29	242,72	-1,57
		139,63	97,29	122,72	-2,73
	V4	29,98	90,11	172,22	3,79
		29,98	90,11	52,22	-2,35
		29,98	90,11	292,22	-1,44

Fonte: autoria própria

Tabela 19 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\epsilon$  simuladas na liga 3 e suas respectivas energias

Grão	Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
		$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
Grão 1	V1	263,35	149,24	211,67	2,45
		263,35	149,24	331,67	1,36
		263,35	149,24	91,67	-3,82
	V2	155,73	122,66	301,13	2,02
		155,73	122,66	181,13	-2,77
		155,73	122,66	61,13	0,75
	V3	7,81	121,02	358,31	-1,02
		7,81	121,02	238,31	0,6
		7,81	121,02	118,31	0,42
	V4	261,75	78,72	150,87	1,88
		261,75	78,72	30,87	-0,2
		261,75	78,72	270,87	-1,68
Grão 2	V1	289,53	163,64	201,56	0,05
		289,53	163,64	321,56	1,93
		289,53	163,64	81,56	-1,98
	V2	184,31	114,67	286,76	-0,16
		184,31	114,67	166,76	0,58
		184,31	114,67	46,76	-0,43
	V3	51,92	119,01	15,38	-4,23
		51,92	119,01	255,38	3,19
		51,92	119,01	135,38	1,04
	V4	297,49	93,27	147,63	-3,26
		297,49	93,27	27,63	3,02
		297,49	93,27	267,63	0,25
Grão 3	V1	298,71	161,14	268,43	2,05
		298,71	161,14	28,43	0,07
		298,71	161,14	148,43	-2,11
	V2	120,6	128,32	270,65	3,22
		120,6	128,32	150,65	-4,21
		120,6	128,32	30,65	0,99
	V3	356	99,81	13,23	0,59
		356	99,81	253,23	-0,17
		356	99,81	133,23	-0,42
	V4	244,3	98,97	166,19	3,05
		244,3	98,97	46,19	-3,16
		244,3	98,97	286,19	0,11

Fonte: autoria própria

Tabela 20 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\alpha'$  simuladas na liga 3 e grão 1, com suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
V1	81,23	165,10	179,95	-1,18
V2	206,21	112,01	116,22	0,08
V3	38,61	64,39	331,24	1,89
V4	318,57	109,41	246,66	1,02
V5	124,55	66,19	29,57	2,05
V6	261,80	33,07	181,40	-0,52
V7	256,20	14,98	6,57	-2,42
V8	30,77	81,01	153,60	2,66
V9	282,18	24,63	252,73	0,06
V10	222,39	102,33	301,04	0,54
V11	301,08	102,38	61,83	2,37
V12	239,34	26,48	111,71	-0,78
V13	134,40	81,77	206,82	3,61
V14	101,26	154,13	288,10	-1,57
V15	79,42	146,90	358,27	0,89
V16	58,25	154,73	68,97	-1,79
V17	305,80	114,43	152,60	-0,76
V18	219,86	114,96	210,95	3,45
V19	138,00	69,40	295,19	-1,74
V20	25,61	69,16	65,66	1,60
V21	43,06	76,55	240,47	2,33
V22	313,22	97,65	334,68	0,46
V23	209,60	99,58	27,87	4,41
V24	121,72	78,76	119,70	-0,83

Fonte: autoria própria

Tabela 21 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\alpha'$  simuladas na liga 3 e grão 2, com suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
V1	123,13	150,40	186,78	-2,26
V2	235,28	116,78	100,70	2,21
V3	66,84	56,78	345,97	2,86
V4	359,06	119,69	258,56	-3,44
V5	164,73	53,58	20,34	-3,27
V6	300,67	47,71	177,03	3,20
V7	300,50	29,49	357,16	0,77
V8	63,36	74,72	167,42	4,16
V9	315,02	39,45	255,85	-1,89
V10	254,26	111,16	288,48	3,42
V11	339,01	115,57	69,17	-3,22
V12	286,20	39,54	98,28	-1,08
V13	172,35	70,53	196,73	-2,59
V14	134,51	139,30	285,42	2,87
V15	118,91	132,37	3,45	-0,56
V16	105,93	141,74	83,17	0,95
V17	346,26	126,84	162,23	3,60
V18	248,34	122,88	196,50	-0,98
V19	178,74	59,04	283,26	3,25
V20	55,03	64,50	81,07	-1,45
V21	74,69	67,61	253,02	-1,42
V22	351,03	109,11	344,49	5,82
V23	242,05	105,58	13,89	-0,49
V24	159,53	65,63	112,26	5,38

Fonte: autoria própria

Tabela 22 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\alpha'$  simuladas na liga 4 e grão 1, com suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
V1	234,76	44,95	153,79	-1,16
V2	262,54	117,63	328,46	4,15
V3	69,16	60,50	130,44	2,84
V4	159,45	89,09	9,81	-2,56
V5	350,66	82,92	260,63	-3,06
V6	71,44	150,28	221,49	0,63
V7	53,11	135,63	26,70	2,20
V8	86,58	49,03	300,29	1,75
V9	71,65	137,43	310,94	-0,23
V10	250,81	133,18	141,59	2,89
V11	163,67	106,82	190,40	-1,54
V12	46,71	147,87	110,92	-2,21
V13	332,34	81,36	83,16	-2,47
V14	252,91	41,58	229,79	0,30
V15	249,40	28,89	321,95	-1,53
V16	225,90	33,35	71,43	2,79
V17	170,43	95,80	281,01	4,43
V18	248,20	120,50	50,74	-1,28
V19	340,73	91,11	171,87	5,22
V20	83,79	61,68	212,61	-0,27
V21	69,45	47,65	41,00	0,41
V22	152,51	99,93	98,53	2,48
V23	267,41	129,83	241,91	-1,03
V24	342,33	72,97	351,65	3,10

Fonte: autoria própria

Tabela 23 – Orientação (ângulos de Euler) das variantes de martensita  $\alpha'$  simuladas na liga 4 e grão 2, com suas respectivas energias

Variante	Ângulos de Euler			U (J/mol)
	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	
V1	110,72	129,48	335,92	0,50
V2	79,15	58,31	153,22	2,66
V3	272,98	124,42	306,84	2,42
V4	184,65	87,91	184,86	-2,93
V5	354,07	100,96	84,98	-2,80
V6	277,33	34,69	35,92	1,75
V7	292,26	49,98	204,75	4,05
V8	253,32	134,66	114,20	1,05
V9	275,45	47,49	126,61	0,71
V10	89,91	42,03	326,25	1,24
V11	181,97	69,88	5,38	-2,49
V12	298,48	37,86	289,52	-0,87
V13	12,63	100,97	268,54	-2,87
V14	94,41	133,56	54,33	1,66
V15	99,23	146,04	147,31	-0,71
V16	119,14	140,91	252,65	4,18
V17	174,21	80,33	96,66	5,12
V18	93,91	54,53	234,29	-1,95
V19	3,35	92,00	356,76	5,26
V20	257,79	122,28	27,72	-1,99
V21	271,48	137,22	216,58	-1,63
V22	192,58	77,73	273,13	2,73
V23	72,61	46,54	67,95	-2,10
V24	3,35	110,22	176,76	2,83

Fonte: autoria própria

## APÊNDICE C – CÓDIGOS-FONTES DO PROGRAMA MATRIZJ

### Código-fonte 1 – MatrizJ

```

1 # Nesse programa vamos calcular a matriz J de transformacao
   a partir dos parametros de rede da martensita alpha e
   austenita gamma.
2
3 def newmatrixJ():
4     import numpy as np
5     import math
6     import symmetry_matrices as sm
7     import print_function as pf
8     import transform_vector_v1 as tv
9     gamma = input("Qual o parametro de rede da austenita? \
   n")
10    alpha = input("Qual o parametro de rede da martensita
   alpha? \n")
11    gamma=float(gamma)
12    alpha=float(alpha)
13    n1=math.sqrt(2)*alpha/gamma
14    n2=n1
15    n3=alpha/gamma
16    #A matriz de Bain eh uma matriz diagonal em que os
   termos sao n1, n1 e n3, respectivamente.
17    BAIN= np.zeros((3,3))
18    BAIN[0][0] = n1
19    BAIN[1][1] = n2
20    BAIN[2][2] = n3
21    #Agora precisamos calcular os vetores u e h, que sao a
   linha e plano invariante para a transformacao.
22    u1=-math.sqrt((math.pow(n1,2)-1)/(math.pow(n1,2)-math.
   pow(n3,2)))

```

```
23     u2=-math.sqrt(1-2*math.pow(u1,2))
24     u3=-u1
25     U=[u1,u2,u3]
26     #o vetor x eh o vetor u apos a transformacao.
27     x1=n1*u1
28     x2=n2*u2
29     x3=n3*u3
30     X=[x1,x2,x3]
31     h1=math.sqrt((-1+(1/math.pow(n1,2)))/((1/math.pow(n1,2)
32         )-(1/math.pow(n3,2))))
33     h2=math.sqrt(1-2*math.pow(h1,2))
34     h3=h1
35     H=[h1,h2,h3]
36     #o vetor l eh o vetor h apos a transformacao.
37     l1=h1/n1
38     l2=h2/n2
39     l3=h3/n3
40     L=[l1,l2,l3]
41     #A eh o produto vetorial entre U e H.
42     A=np.cross(U,H)
43     a1 = A[0]
44     a2 = A[1]
45     a3 = A[2]
46     #B eh o produto vetorial entre X e L.
47     B=np.cross(X,L)
48     b1=B[0]
49     b2=B[1]
50     b3=B[2]
51     #CM eh a matriz de correspondencia.
52     CM = np.array([[1,-1,0],[1,1,0],[0,0,1]])
53     #BD eh a matriz antes da deformacao.
54     BD= np.zeros((3,3))
```

```

54 BD=np.array([[u1,h1,a1],[u2,h2,a2],[u3,h3,a3]])
55 #AD eh a matriz apos a transformacao.
56 AD= np.zeros((3,3))
57 AD=np.array([[x1,l1,b1],[x2,l2,b2],[x3,l3,b3]])
58 INV_AD=np.linalg.inv(AD)
59 ROT_MAT=np.matmul(BD,INV_AD)
60 INV_LIN=np.matmul(ROT_MAT,BAIN)
61 LN_ST=np.linalg.inv(INV_LIN)
62 J=np.matmul(CM,LN_ST)
63 J_INV=np.linalg.inv(J)
64 #Agora podemos calcular as direcoes, plano de habito e
    a deformacao total.
65 LAT_INV_PL=np.array([[0.707107],[0.0],[0.707107]])
66 LAT_INV_PL_e=np.array([[0.707107],[0.0],[-0.707107]])
67 LAT_INV_DI=np.array([0.707107,0.0,0.707107])
68 LAT_INV_DI_e=np.array([0.707107,0.0,-0.707107])
69 #Plano de habito
70 HABIT=np.array([0,0,0])
71 HABIT=np.matmul(LAT_INV_DI,LN_ST)
72 i=0
73 while i<3:
74     HABIT[i] = LAT_INV_DI[i] - HABIT[i]
75     i=i+1
76 HABIT = HABIT/math.sqrt(np.matmul(HABIT,HABIT))
77 #Calculo da direcao
78 d=np.array([[0],[0],[0]])
79 d=np.matmul(INV_LIN,LAT_INV_PL_e)
80 i=0
81 while i<3:
82     d[[i][0]]=d[[i][0]]-LAT_INV_PL_e[i]
83     i=i+1

```

```

84 C = HABIT[0] * LAT_INV_PL_e[0] + HABIT[1] *
    LAT_INV_PL_e[1] + HABIT[2] * LAT_INV_PL_e[2]
85 i=0
86 while i<3:
87     d[[i][0]]=d[[i][0]]/C
88     i=i+1
89 m2=d[[0][0]]*d[[0][0]] + d[[1][0]]*d[[1][0]] + d
    [[2][0]]*d[[2][0]]
90 M=math.sqrt(m2)
91 i=0
92 v=0
93 d=d/M
94 while i<3:
95     v = v + d[[i][0]]*HABIT[i]
96     i=i+1
97 v=v*M
98 s2 = m2-v*v
99 HABIT2 = np.array([[HABIT[0],HABIT[1],HABIT[2]]])
100 s = math.sqrt(s2)
101 defvec=np.zeros((1,2))
102 defvec[0][0]=v
103 defvec[0][1]=s
104 pf.print_txt(defvec,'deformationvector.txt')
105 #shape deformation matrix:
106 FPF=np.matmul(d, HABIT2)
107 FPF=M*FPF
108 FPF=np.identity(3)+FPF
109 #Calculo dos 24 planos de habito, dire es e matrizes
    de transformacao
110 A=1
111 B=np.zeros((3,3))
112 while A<25:

```

```
113     B=sm.symmetry_matrices(A)
114     V=np.dot(B,HABIT)
115     A=A+1
116     pf.print_txt(V,'habitplanes.txt')
117 A=1
118 B=np.zeros((3,3))
119 while A<25:
120     B=sm.symmetry_matrices(A)
121     dot = np.dot(B,d)
122     A=A+1
123     dot=tv.transform_vector(dot)
124     pf.print_txt(dot,'directions.txt')
125 A=1
126 Jvar=np.zeros((3,3))
127 pf.print_txt(J,'alphaJgamma.txt')
128 while A<25:
129     B=sm.symmetry_matrices(A)
130     Jvar=np.matmul(J,B)
131     pf.print_txt(Jvar,'alphaJgammaVAR.txt')
132     A=A+1
133 newmatrixJ()
```

**APÊNDICE D – CÓDIGOS-FONTES DO PROGRAMA VARIANTES**

## Código-fonte 2 – Modelo de Patel-Cohen

```
1 def PatelCohen_v2():
2     import numpy as np
3     import math
4     import matrixG as mG
5     import transform_vector_v1 as tv
6     import Cramer as C
7     import print_function as pf
8     import eulerangles_v2 as ea
9     #Esse programa calcula a energia das variantes atraves
10    do modelo de Patel-Cohen
11    #0 primeiro passo eh importar as direcoes, planos de
12    habito e matrizes de transformacao calculadas no
13    programa MatrizJ
14    r=24
15    habits=np.loadtxt('habitplanes.txt')
16    directions=np.loadtxt('directions.txt')
17    alphaJgamma=np.loadtxt('alphaJgamma.txt')
18    defvec=np.load('deformationvector.txt')
19    sh=defvec[0][0]
20    di=defvec[0][1]
21    i=0
22    U=np.zeros(r)
23    p=np.zeros(3)
24    d=np.zeros(3)
25    theta=np.zeros(r)
26    beta=np.zeros(r)
27    p_into_d=np.zeros(r)
28    alph_new=np.zeros(r)
29    tao=np.zeros((r,3))
```

```
27 shear=np.zeros((r,3))
28 sigma=np.zeros((r,3))
29 phi=np.zeros(r)
30 stress_tensor=np.zeros((3,3))
31 stress_tensor[0][0]=input("Put the stress value:")
32 trans_matrix=mG.matrixg()
33 temp=np.matmul(trans_matrix, stress_tensor)
34 trans_matrix_inv=np.linalg.inv(trans_matrix)
35 def_mat=np.matmul(temp, trans_matrix_inv)
36 print("\n\nDeformation Matrix:\n", def_mat)
37 i=0
38 j=0
39 for i in range(r):
40     for j in range(3):
41         p[j]=habits[i][j]
42         continue
43     sigma=np.zeros(3)
44     sigma=np.matmul(def_mat, p)
45     stress=np.linalg.norm(sigma)
46     sigma=sigma/stress
47     A=0
48     A=np.dot(p, sigma)
49     if A>1:
50         A=1
51     if A<-1:
52         A=-1
53     theta[i]=np.arccos(A)
54     k=np.cross(p, sigma)
55     k=k/np.linalg.norm(k)
56     if theta[i] <pi/2:
57         beta[i]=theta[i]-pi/2
58     else:
```

```

59         beta[i]=pi/2-theta[i]
60     d[2]=math.cos(beta[i])
61     tao_temp=C.CRAMER(p,k,sigma,d)
62     l=0
63     for l in range(3):
64         tao[i][l]=tao_temp[l]
65         continue
66     m=0
67     direc=np.zeros(3)
68     for m in range(3):
69         direc[m]=directions[i][m]
70         continue
71     n=np.cross(p,direc)
72     n=n/np.linalg.norm(n)
73     print("n is", n)
74     p_into_d[i]=np.dot(p,direc)
75     p_into_d[i]=np.arccos(p_into_d[i])
76     if p_into_d[i] <pi/2:
77         alph_new[i]=pi/2 - p_into_d[i]
78     else:
79         alph_new[i]=p_into_d[i]-pi/2
80     #print("alph_new is", alph_new[i])
81     d[2]=math.cos(alph_new[i])
82     sh_temp=C.CRAMER(p,n,direc,d)
83     q=0
84     for q in range(3):
85         shear[i][q]=sh_temp[q]
86         continue
87     phi[i]=np.dot(tao_temp,sh_temp)
88     if phi[i]>1:
89         phi[i]=1
90     if phi[i]<-1:

```

```
91         phi[i]=-1
92     phi[i]=np.arccos(phi[i])
93     THE=theta[i]*180/math.pi
94     PH=phi[i]*180/math.pi
95     print("theta is", THE)
96     print("phi is", PH)
97     sig=di*stress*np.cos(theta[i])
98     #print("sig is", sig)
99     if theta[i]!=0:
100         ta=sh*stress*np.cos(beta[i])*np.cos(phi[i])
101     else:
102         ta=0
103     #print("ta is", ta)
104     U[i]=ta+sig
105     A=0
106     A=ta+sig
107     vector=np.zeros((1,2))
108     vector[0][0]=A
109     vector[0][1]=i+1
110     #print('vector is:',vector)
111     pf.print_txt(vector,'Uenergy.txt')
112     continue
113 print(U)
114 ea.euler_angles(trans_matrix,r)
115 PatelCohen_v2()
```

## Código-fonte 3 – Modelo de Humbert

```

1 def Humbert():
2     import numpy as np
3     import transform_vector_v1 as tv
4     import symmetry_matrices as sm
5     import print_function as pf
6     import transform_vector_v1 as tv
7     import matrixG as mG
8     import math
9     import tfunc as tf
10    m=np.sqrt(1/8)
11    d=np.zeros((1,3))
12    p=np.zeros((1,3))
13    n=np.zeros((1,3))
14    b=np.zeros((1,3))
15    A=1
16    r=12
17    trans_matrix=mG.matrixg()
18    print("G is:",trans_matrix)
19    M=np.zeros((3,3))
20    G=np.zeros((3,3))
21    G_ep=np.zeros((3,3))
22    EP=np.zeros((3,3))
23    stress_tensor=np.zeros((3,3))
24    stress_tensor[0][0]=input("Put the stress value:")
25 #Voce precisa definir os planos e direcoes de deslizamento
    para a formacao da martensita, aqui utilizamos as
    parciais de Schockley.
26 while A<13:
27     if A==1:
28         p=np.array([[1,1,1]])
29         d=np.array([[ -2], [1], [1]])

```

```
30     if A==2:
31         p=np.array([[1,1,1]])
32         d=np.array([[1],[-2],[1]])
33     if A==3:
34         p=np.array([[1,1,1]])
35         d=np.array([[1],[1],[-2]])
36     if A==4:
37         p=np.array([[ -1,1,1]])
38         d=np.array([[2],[1],[1]])
39     if A==5:
40         p=np.array([[ -1,1,1]])
41         d=np.array([[ -1],[-2],[1]])
42     if A==6:
43         p=np.array([[ -1,1,1]])
44         d=np.array([[ -1],[1],[-2]])
45     if A==7:
46         p=np.array([[1,-1,1]])
47         d=np.array([[ -2],[-1],[1]])
48     if A==8:
49         p=np.array([[1,-1,1]])
50         d=np.array([[1],[2],[1]])
51     if A==9:
52         p=np.array([[1,-1,1]])
53         d=np.array([[1],[-1],[-2]])
54     if A==10:
55         p=np.array([[1,1,-1]])
56         d=np.array([[ -2],[1],[-1]])
57     if A==11:
58         p=np.array([[1,1,-1]])
59         d=np.array([[1],[-2],[-1]])
60     if A==12:
61         p=np.array([[1,1,-1]])
```

```

62         d=np.array([[1],[1],[2]])
63     b[0][0]=d[0][0]/(math.sqrt((d[0][0]**2)+(d
        [1][0]**2)+(d[2][0]**2)))
64     b[0][1]=d[1][0]/(math.sqrt((d[0][0]**2)+(d
        [1][0]**2)+(d[2][0]**2)))
65     b[0][2]=d[2][0]/(math.sqrt((d[0][0]**2)+(d
        [1][0]**2)+(d[2][0]**2)))
66     n[0][0]=p[0][0]/(math.sqrt((p[0][0]**2)+(p
        [0][1]**2)+(p[0][2]**2)))
67     n[0][1]=p[0][1]/(math.sqrt((p[0][0]**2)+(p
        [0][1]**2)+(p[0][2]**2)))
68     n[0][2]=p[0][2]/(math.sqrt((p[0][0]**2)+(p
        [0][1]**2)+(p[0][2]**2)))
69     cross=np.cross(n,b)
70     #print('cross is', cross)
71     M[0][0]=b[0][0]
72     M[0][1]=cross[0][0]
73     M[0][2]=n[0][0]
74     M[1][0]=b[0][1]
75     M[1][1]=cross[0][1]
76     M[1][2]=n[0][1]
77     M[2][0]=b[0][2]
78     M[2][1]=cross[0][2]
79     M[2][2]=n[0][2]
80     #print('M is', M)
81     #i=1
82     trans_matrix_trans=np.transpose(trans_matrix)
83     M_trans=np.transpose(M)
84     EP=np.matmul(M_trans,trans_matrix)
85     #print("EP is:",EP)
86     el=tf.angulo(EP)
87     print("euler angles is:",el)

```

```

88     pf.print_txt(e1, 'euleranglesEPSILON2.txt')
89     tension_axis=np.zeros([1,3])
90     tension_axis[0][0]=trans_matrix[0][0]
91     tension_axis[0][1]=trans_matrix[1][0]
92     tension_axis[0][2]=trans_matrix[2][0]
93     #print("tension_axis is:",tension_axis)
94     #print("\nb is:",b)
95     #print("\nn is:",n)
96     #Dot product - find cossines
97         dot_direction=b[0][0]*tension_axis
98             [0][0]+b[0][1]*tension_axis[0][1]+b
99             [0][2]*tension_axis[0][2]
100     dot_plane=n[0][0]*tension_axis[0][0]+n[0][1]*
101         tension_axis[0][1]+n[0][2]*tension_axis[0][2]
102     SF=dot_plane*dot_direction
103     print("schmid factor is:",SF)
104     vector1=np.zeros((1,2))
105     vector1[0][0]=SF
106     vector1[0][1]=A
107     pf.print_txt(vector1, 'SchmidFactor.txt')
108     Ue=SF*m*stress_tensor[0][0]/2
109     print("Mechanical work is is:",Ue)
110     vector=np.zeros((1,2))
111     vector[0][0]=Ue
112     vector[0][1]=A
113     pf.print_txt(vector, 'Uenergy.txt')
114     A=A+1
115     Humbert()

```

## APÊNDICE E – CÓDIGO-FONTE DO PROGRAMA MATRIZG

### Código-fonte 4 – MatrizG

```

1 def matrixg():
2     #Essa funcao calcula a matriz g de orientacao em
3     relacao aos angulos de Euler
4     import math
5     import numpy as np
6     print("We are going to calculate the G matrix in
7     relationship of Euler angles.")
8     phi1 = float(input("Write phi1: "))
9     PHI = float(input("Write PHI: "))
10    phi2 = float(input("Write phi2: "))
11    rphi1 = math.radians(phi1)
12    rphi2 = math.radians(phi2)
13    rPHI = math.radians(PHI)
14    G=np.zeros([3,3])
15    G[0][0] = math.cos(rphi1) * math.cos(rphi2) - math.sin(
16    rphi1) * math.sin(rphi2) * math.cos(rPHI)
17    G[0][1] = math.sin(rphi1) * math.cos(rphi2) + math.cos(
18    rphi1) * math.sin(rphi2) * math.cos(rPHI)
19    G[0][2] = math.sin(rphi2) * math.sin(rPHI)
20    G[1][0] = -math.cos(rphi1) * math.sin(rphi2) - math.sin
21    (rphi1) * math.cos(rphi2) * math.cos(rPHI)
22    G[1][1] = -math.sin(rphi1) * math.sin(rphi2) + math.cos
23    (rphi1) * math.cos(rphi2) * math.cos(rPHI)
24    G[1][2] = math.cos(rphi2) * math.sin(rPHI)
25    G[2][0] = math.sin(rphi1) * math.sin(rPHI)
26    G[2][1] = - math.cos(rphi1) * math.sin(rPHI)
27    G[2][2] = math.cos(rPHI)
28    if (abs(G[0][0]) < 0.0001):
29        G[0][0] = 0.0000

```

```
24     if (abs(G[0][1]) < 0.0001):
25         G[0][1]= 0.0000
26     if (abs(G[0][2]) < 0.0001):
27         G[0][2]= 0.0000
28     if (abs(G[1][0]) < 0.0001):
29         G[1][0]= 0.0000
30     if (abs(G[1][1]) < 0.0001):
31         G[1][1]= 0.0000
32     if (abs(G[1][2]) < 0.0001):
33         G[1][2]= 0.0000
34     if (abs(G[2][0]) < 0.0001):
35         G[2][0]= 0.0000
36     if (abs(G[2][1]) < 0.0001):
37         G[2][1]= 0.0000
38     if (abs(G[2][2]) < 0.0001):
39         G[2][2]= 0.0000
40     print("The G matrix is \n",G)
41     return G
```

## APÊNDICE F – CÓDIGOS-FONTES DAS SUBROTINAS UTILIZADAS COMO FUNÇÕES NOS PROGRAMAS PRINCIPAIS

### Código-fonte 5 – Subrotina symmetry matrices

```
1 #Essas sao as matrizes de simetria para o cristal CFC da
   austenita.
2 def symmetry_matrices(A):
3     import numpy as np
4     R=np.zeros((3,3))
5     if A==1:
6         R=([1,0,0],[0,1,0],[0,0,1])
7     if A==2:
8         R=([-1,0,0],[0,0,1],[0,1,0])
9     if A==3:
10        R=([-1,0,0],[0,0,-1],[0,-1,0])
11    if A==4:
12        R=([0,0,1],[0,-1,0],[1,0,0])
13    if A==5:
14        R=([0,0,-1],[0,-1,0],[-1,0,0])
15    if A==6:
16        R=([0,1,0],[1,0,0],[0,0,-1])
17    if A==7:
18        R=([0,-1,0],[-1,0,0],[0,0,-1])
19    if A==8:
20        R=([1,0,0],[0,0,1],[0,-1,0])
21    if A==9:
22        R=([1,0,0],[0,-1,0],[0,0,-1])
23    if A==10:
24        R=([1,0,0],[0,0,-1],[0,1,0])
25    if A==11:
26        R=([0,0,-1],[0,1,0],[1,0,0])
27    if A==12:
```

```
28         R=([-1,0,0],[0,1,0],[0,0,-1])
29     if A==13:
30         R=([0,0,1],[0,1,0],[-1,0,0])
31     if A==14:
32         R=([0,1,0],[-1,0,0],[0,0,1])
33     if A==15:
34         R=([-1,0,0],[0,-1,0],[0,0,1])
35     if A==16:
36         R=([0,-1,0],[1,0,0],[0,0,1])
37     if A==17:
38         R=([0,1,0],[0,0,1],[1,0,0])
39     if A==18:
40         R=([0,0,1],[1,0,0],[0,1,0])
41     if A==19:
42         R=([0,1,0],[0,0,-1],[-1,0,0])
43     if A==20:
44         R=([0,0,-1],[1,0,0],[0,-1,0])
45     if A==21:
46         R=([0,0,1],[-1,0,0],[0,-1,0])
47     if A==22:
48         R=([0,-1,0],[0,0,-1],[1,0,0])
49     if A==23:
50         R=([0,0,-1],[-1,0,0],[0,1,0])
51     if A==24:
52         R=([0,-1,0],[0,0,1],[-1,0,0])
53     return R
```

## Código-fonte 6 – Subrotina Cramer

```
1 def CRAMER(X,Y,Z,Q):
2     import numpy as np
3     T=np.zeros(3)
4     EQU=np.zeros((3,3))
5     TEMPO=np.zeros((3,3))
6     j=0
7     for j in range(3):
8         EQU[0][j]=X[j]
9         TEMPO[0][j]=X[j]
10        EQU[1][j]=Y[j]
11        TEMPO[1][j]=Y[j]
12        EQU[2][j]=Z[j]
13        TEMPO[2][j]=Z[j]
14        continue
15    DET_EQU=np.linalg.det(EQU)
16    for i in range(3):
17        for j in range(3):
18            TEMPO[j][i]=Q[j]
19            continue
20        DET_TEMPO=np.linalg.det(TEMPO)
21        T[i]=DET_TEMPO/DET_EQU
22        for j in range(3):
23            TEMPO[j][i]=EQU[j][i]
24            continue
25        continue
26    return(T)
```

## Código-fonte 7 – Subrotina para Cálculo dos Ângulos de Euler para Martensita CCC

```

1 #Essa rotina calcula os angulos de Euler para a
   transformacao da martensita alpha
2 def euler_angles():
3     import numpy as np
4     import math
5     import leitura
6     import matrixG
7     import print_function as pf
8     i=0
9     trans_matrix=matrixG.matrixg()
10    trans_matrix_inv=np.linalg.inv(trans_matrix)
11    N=np.zeros((3,3))
12    n=24
13    print('a is:', a)
14    #das 24 matrizes 3,3 em gammaJalpha, precisamos pegar
       uma por uma!
15    #agora vamos calcular os angulos de euler:
16    for i in range(n):
17        print('i is:', i)
18        print('a is:', a)
19        #abrindo os arquivos alphaJgammaVAR e lendo cada
           matriz 3x3 por vez:
20        N=leitura.leitura(i,a)
21        print('\n\n N is', N)
22        # inverso da matriz J ser gamaJalpha:
23        gm_J_al=np.linalg.inv(N)
24        print('\n gm_J_al is',gm_J_al)
25        #a matriz de transforma o sampleJmartensita a
           multiplica o da trans_matrix pela gammaJalfa
26        sp_J_mr=np.matmul(trans_matrix_inv,gm_J_al)
27        #sp_J_mr=np.matmul(gm_J_al,trans_matrix_inv)

```

```

28     mr_J_sp=np.linalg.inv(sp_J_mr)
29     A=math.sqrt((mr_J_sp[0,0])**2+(mr_J_sp[1,0])**2+(
        mr_J_sp[2,0])**2)
30     B=math.sqrt((mr_J_sp[0,1])**2+(mr_J_sp[1,1])**2+(
        mr_J_sp[2,1])**2)
31     C=math.sqrt((mr_J_sp[0,2])**2+(mr_J_sp[1,2])**2+(
        mr_J_sp[2,2])**2)
32     #transformando em vetor unitario:
33     for i in range (3):
34         mr_J_sp[i,0]=mr_J_sp[i,0]/A
35         mr_J_sp[i,1]=mr_J_sp[i,1]/B
36         mr_J_sp[i,2]=mr_J_sp[i,2]/C
37         #calculo dos angulos:
38         phi=np.arccos(mr_J_sp[2,2])
39         cos_phi1=-mr_J_sp[2,1]/math.sin(phi)
40         sin_phi1=mr_J_sp[2,0]/math.sin(phi)
41         if cos_phi1 >=0 and sin_phi1 >=0: phi1=np.
            arccos(cos_phi1)
42         if cos_phi1 <=0 and sin_phi1 >=0: phi1=np.
            arccos(cos_phi1)
43         if cos_phi1 <=0 and sin_phi1 <=0: phi1=3*math.
            pi/2-(np.arccos(cos_phi1)-math.pi/2)
44         if cos_phi1 >=0 and sin_phi1 <=0: phi1=2*math.
            pi-np.arccos(cos_phi1)
45         cos_phi2=(mr_J_sp[1,2]/math.sin(phi))
46         sin_phi2=(mr_J_sp[0,2]/math.sin(phi))
47         if cos_phi2 >=0 and sin_phi2 >=0: phi2=np.
            arccos(cos_phi2)
48         if cos_phi2 <=0 and sin_phi2 >=0: phi2=np.
            arccos(cos_phi2)
49         if cos_phi2 <=0 and sin_phi2 <=0: phi2=3*math.
            pi/2-(np.arccos(cos_phi2)-math.pi/2)

```

```

50         if cos_phi2 >=0 and sin_phi2 <=0: phi2=2*math.
           pi-np.arccos(cos_phi2)
51     #transformando em graus:
52     phi=phi*180/math.pi
53     phi1=phi1*180/math.pi
54     phi2=phi2*180/math.pi
55     print('phi1 & phi & phi2=', phi1, phi, phi2)
56     print(' ')
57     eulerangles=np.zeros((1,3))
58     eulerangles[0,0]=phi1
59     eulerangles[0,1]=phi
60     eulerangles[0,2]=phi2
61     pf.print_txt(eulerangles,'euleranglesALPHAall.txt')
62 euler_angles()

```

#### Código-fonte 8 – Subrotina para Cálculo dos Ângulos de Euler para Martensita HC

```

1  import math
2  import numpy as np
3  def angulo(A):
4      g11 = A[0][0]
5      g12 = A[0][1]
6      g13 = A[0][2]
7      g21 = A[1][0]
8      g22 = A[1][1]
9      g23 = A[1][2]
10     g31 = A[2][0]
11     g32 = A[2][1]
12     g33 = A[2][2]
13     cosFI = g33
14     senFI = math.sqrt(1 - (g33*g33))
15     senfi1 = g31/senFI

```

```

16     if(senfi1 > 1):
17         senfi1 = 1
18     if(senfi1 < -1):
19         senfi1 = -1
20     cosfi1 = -g32/senFI
21     if(cosfi1 > 1):
22         cosfi1 = 1
23     if(cosfi1 < -1):
24         cosfi1 = -1
25     senfi2 = g13/senFI
26     if(senfi2 > 1):
27         senfi2 = 1
28     if(senfi2 < -1):
29         senfi2 = -1
30     cosfi2 = g23/senFI
31     if(cosfi2 > 1):
32         cosfi2 = 1
33     if(cosfi2 < -1):
34         cosfi2 = -1
35     g11t = cosfi1*cosfi2 - senfi1*senfi2*g33
36     g12t = senfi1*cosfi2 + cosfi1*senfi2*g33
37     g21t = -cosfi1*senfi2 - senfi1*cosfi2*g33
38     g22t = -senfi1*senfi2 + cosfi1*cosfi2*g33
39     if (abs(g11-g11t) < math.pow(10,5) and abs(g12-g12t) <
40         math.pow(10,5) and abs(g21 - g21t) < math.pow(10,5)
41         and abs(g22- g22t) < math.pow(10,5)):
42         senFI = math.sqrt(1 - (g33*g33))
43         senfi1 = g31/senFI
44         if(senfi1 > 1):
45             senfi1 = 1
46         if(senfi1 < -1):
47             senfi1 = -1

```

```
46     cosfi1 = -g32/senFI
47     if(cosfi1 > 1):
48         cosfi1 = 1
49     if(cosfi1 < -1):
50         cosfi1 = -1
51     senfi2 = g13/senFI
52     if(senfi2 > 1):
53         senfi2 = 1
54     if(senfi2 < -1):
55         senfi2 = -1
56     cosfi2 = g23/senFI
57     if(cosfi2 > 1):
58         cosfi2 = 1
59     if(cosfi2 < -1):
60         cosfi2 = -1
61 else:
62     senFI = -math.sqrt(1 - (g33*g33))
63     senfi1 = g31/senFI
64     if(senfi1 > 1):
65         senfi1 = 1
66     if(senfi1 < -1):
67         senfi1 = -1
68     cosfi1 = -g32/senFI
69     if(cosfi1 > 1):
70         cosfi1 = 1
71     if(cosfi1 < -1):
72         cosfi1 = -1
73     senfi2 = g13/senFI
74     if(senfi2 > 1):
75         senfi2 = 1
76     if(senfi2 < -1):
77         senfi2 = -1
```

```
78     cosfi2 = g23/senFI
79     if(cosfi2 > 1):
80         cosfi2 = 1
81     if(cosfi2 < -1):
82         cosfi2 = -1
83     g11t = cosfi1*cosfi2 - senfi1*senfi2*g33
84     g12t = senfi1*cosfi2 + cosfi1*senfi2*g33
85     g21t = -cosfi1*senfi2 - senfi1*cosfi2*g33
86     g22t = -senfi1*senfi2 + cosfi1*cosfi2*g33
87     if (abs(g11-g11t) < math.pow(10,5) and abs(g12-g12t
88         ) < math.pow(10,5) and abs(g21 - g21t) < math.
89         pow(10,5) and abs(g22- g22t) < math.pow(10,5)):
90         senFI = -math.sqrt(1 - (g33*g33))
91         senfi1 = g31/senFI
92         if(senfi1 > 1):
93             senfi1 = 1
94         if(senfi1 < -1):
95             senfi1 = -1
96         cosfi1 = -g32/senFI
97         if(cosfi1 > 1):
98             cosfi1 = 1
99         if(cosfi1 < -1):
100             cosfi1 = -1
101         senfi2 = g13/senFI
102         if(senfi2 > 1):
103             senfi2 = 1
104         if(senfi2 < -1):
105             senfi2 = -1
106         cosfi2 = g23/senFI
107         if(cosfi2 > 1):
108             cosfi2 = 1
109         if(cosfi2 < -1):
```

```
108         cosfi2 = -1
109     else:
110         print("tem erro")
111 #calculo do angulo FI
112 if (senFI != 0 and cosFI != 0):
113     if (senFI > 0 and cosFI > 0):
114         FI = math.asin(senFI)
115     if (senFI > 0 and cosFI < 0):
116         FI = math.pi - math.asin(senFI)
117     if (senFI < 0 and cosFI < 0):
118         FI = math.pi-math.asin(senFI)
119     if (senFI < 0 and cosFI > 0):
120         FI = 2*math.pi + math.asin(senFI)
121 else:
122     if (senFI == 0 and cosFI == 1):
123         FI = 0
124     if (senFI == 0 and cosFI == -1):
125         FI = math.pi
126     if (senFI == 1 and cosFI == 0):
127         FI = math.pi/2
128     if (senFI == -1 and cosFI == 0):
129         FI = 3*math.pi/2
130 #calculo do angulo fi1
131 if (senfi1 != 0 and cosfi1 != 0):
132     if (senfi1 > 0 and cosfi1 > 0):
133         fi1 = math.asin(senfi1)
134     if (senfi1 > 0 and cosfi1 < 0):
135         fi1 = math.pi - math.asin(senfi1)
136     if (senfi1 < 0 and cosfi1 < 0):
137         fi1 = math.pi-math.asin(senfi1)
138     if (senfi1 < 0 and cosfi1 > 0):
139         fi1 = 2*math.pi + math.asin(senfi1)
```

```
140 else:
141     if (senfi1 == 0 and cosfi1 == 1):
142         fi1 = 0
143     if (senfi1 == 0 and cosfi1 == -1):
144         fi1 = math.pi
145     if (senfi1 == 1 and cosfi1 == 0):
146         fi1 = math.pi/2
147     if (senfi1 == -1 and cosfi1 == 0):
148         fi1 = 3*math.pi/2
149 #calculo do angulo fi2
150 if (senfi2 != 0 and cosfi2 != 0):
151     if (senfi2 > 0 and cosfi2 > 0):
152         fi2 = math.asin(senfi2)
153     if (senfi2 > 0 and cosfi2 < 0):
154         fi2 = math.pi - math.asin(senfi2)
155     if (senfi2 < 0 and cosfi2 < 0):
156         fi2 = math.pi-math.asin(senfi2)
157     if (senfi2 < 0 and cosfi2 > 0):
158         fi2 = 2*math.pi + math.asin(senfi2)
159 else:
160     if (senfi2 == 0 and cosfi2 == 1):
161         fi2 = 0
162     if (senfi2 == 0 and cosfi2 == -1):
163         fi2 = math.pi
164     if (senfi2 == 1 and cosfi2 == 0):
165         fi2 = math.pi/2
166     if (senfi2 == -1 and cosfi2 == 0):
167         fi2 = 3*math.pi/2
168 ang = np.zeros([3])
169 dfi1=math.degrees(fi1)
170 dFI=math.degrees(FI)
171 dfi2=math.degrees(fi2)
```

```
172     ang[0] = dfi1
173     ang[1] = dFI
174     ang[2] = dfi2
175     return ang
176 #print(angulo(g))
```

## ANEXO A – VARIANTES CRISTALOGRÁFICAS

Como explicado na seção 4 deste trabalho, existe um número de soluções cristalográficas relacionadas para uma orientação, dependendo do sistema de cristal. Estas soluções cristalográficamente relacionadas são geradas pela multiplicação da matriz de orientação (G) por um operador de simetria (M), como mostrado na equação A.1.

$$G_n = G.M_n \tag{A.1}$$

Onde n depende da simetria do cristal. Para um cristal cúbico, as 24 matrizes de simetria estão representadas na Figura 60.

Figura 60 – Matrizes de Variantes para o Sistema Cúbico

$$\begin{array}{cccc}
 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ \bar{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} \\
 \\
 \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Fonte: (ENGLER; RANDLE, 2009)