UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE MATERIALES



MODELIZACIÓN DE LAS TRANSFORMACIONES DE FASE EN CALENTAMIENTO CONTINUO DE ACEROS CON MICROESTRUCTURA INICIAL DE FERRITA, PERLITA Y FERRITA-PERLITA

TESIS DOCTORAL

FRANCISCA GARCÍA CABALLERO

Director: CARLOS GARCÍA DE ANDRÉS



DEPARTAMENTO DE METALURGIA FÍSICA CENTRO NACIONAL DE INVESTIGACIONES METALÚRGICAS CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

Madrid, Enero de 1999

MODELIZACIÓN DE LAS TRANSFORMACIONES DE FASE EN CALENTAMIENTO CONTINUO DE ACEROS CON MICROESTRUCTURA INICIAL DE FERRITA, PERLITA Y FERRITA-PERLITA

Francisca García Caballero

"En esto, descubrieron treinta o cuarenta molinos de viento que hay en aquel campo; y, así como don Quijote los vio, dijo a su escudero:

-La ventura va guiando nuestras cosas mejor de lo que acertáramos a desear, porque ves allí, amigo Sancho Panza, donde se descubren treinta, o pocos más, desaforados gigantes, con quien pienso hacer batalla y quitarles a todos las vidas, con cuyos despojos comenzaremos a enriquecer; que ésta es buena guerra, y es gran servicio de Dios quitar tan mala simiente de sobre la faz de la tierra.

-¿Qué gigantes? -dijo Sancho Panza."

El Ingenioso Hidalgo Don Quijote de la Mancha

Miguel de Cervantes Saavedra

A mi familia y a todos los que de alguna manera me han animado y ayudado a hacer realidad este sueño. La presente Memoria constituye la Tesis Doctoral de Dña. Francisca García Caballero, presentada en el Departamento de Física de Materiales de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid, para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas.

Este trabajo ha sido realizado en el Departamento de Metalurgia Física del Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas (C.S.I.C), bajo la dirección del Dr. D. Carlos García de Andrés, Investigador Científico del C.S.I.C.

I.

÷

Agradecimientos

Quiero expresar mi especial agradecimiento al Dr. D. Carlos García de Andrés por el estímulo que de él he recibido y por su interés y constante apoyo en la ejecución y elaboración de esta Tesis.

Agradezco al Dr. D. Javier del Río, Profesor Titular del Departamento de Física de Materiales de la Facultad de Ciencias Físicas (U.C.M.) la labor y dedicación que ha prestado en esta Tesis, como Tutor de la misma.

Al Dr. D. Antonio Formoso Prego, Director del CENIM, por las facilidades que he recibido para realizar este trabajo en las instalaciones del mismo. Mi sincero agradecimiento al Dr. D. Victor López por la ayuda recibida en el tema de Metalografía. Igualmente, quiero expresar mi gratitud al Dr. H.K.D.H. Bhadeshia, Reader en Physical Metallurgy en la Universidad de Cambridge, por las facilidades prestadas en el laboratorio de Microscopía Electrónica de esa Universidad.

Agradezco a Dña. Monserrat Aparicio su ayuda y sabios consejos delante del Microscopio Electrónico de Barrido, y a D. Cecilio Martínez y D. Ramón Bartolomé 'las cientos' de micrografías que han revelado para este trabajo.

Finalmente, quiero expresar mi especial gratitud a D. Norberto Santos, D. Javier Vara y Dr. Dña. Luisa Fernanda Alvarez quienes con su inestimable colaboración han hecho de esta Tesis algo propio. Asimismo, quiero que conste mi más sincero agradecimiento a mi compañero y amigo D. Carlos Capdevila, que en todo momento me ha alentado a llevar a cabo este trabajo.

Resumen

En este trabajo se han efectuado modelos teóricos que describen los diferentes procesos de nucleación y crecimiento que caracterizan las transformaciones de fases producidas durante el calentamiento continuo de aceros con diferentes composiciones y microestructuras iniciales. Dichos modelos se han aplicado con éxito al cálculo de la fracción de volumen de austenita que se forma, en función de la temperatura, durante el calentamiento continuo de aceros con contenido de carbono ultra-bajo, bajo y alto y con microestructuras iniciales de ferrita, perlita y ferrita-perlita. La influencia de factores como la morfología de la perlita, el tamaño de grano ferrítico, la fracción de volumen inicial de perlita y la velocidad de calentamiento ha sido específicamente analizada en estos modelos. Su validación experimental se ha llevado a cabo con excelentes resultados mediante la aplicación de técnicas de dilatometría de alta resolución y análisis microestructural. Con este objetivo se ha realizado un amplio estudio experimental de las transformaciones de fases que tienen lugar durante el proceso de austenización en calentamiento continuo de estos aceros.

Por otra parte, debido a la importancia del análisis dilatométrico en el estudio de las transformaciones de fases en estado sólido de aceros, en este trabajo se han realizado también modelos que permiten calcular la variación relativa de longitud en función de la temperatura en el calentamiento continuo a partir del conocimiento de la cinética de las transformaciones que tienen lugar, de los parámetros de red y de los coeficientes de dilatación térmica de las fases presentes. Estos modelos, que han sido también convenientemente validados a nivel experimental, permiten, en definitiva, predecir satisfactoriamente el comportamiento dilatométrico del proceso de austenización en calentamiento continuo de aceros eutectoides, ferríticos y ferrítico-perlíticos.

Índice

CAPÍTULO 1

1.1	Acerol	Perlítico
	1.1.1	Consideraciones Generales
	1.1.2	Preparación y Caracterización de Muestras. Procedimientos
		Experimentales
	1.1.3	Análisis Morfológico de la Perlita
		1.1.3.1 Método Cuantitativo de Medida del Espaciado
		Interlaminar
		1.1.3.2 Cinética de Crecimiento de la Perlita. Cálculo del
		Espaciado Interlaminar
1.2	Aceros	Ferríticos
	1.2.1	Caracterización de Materiales
1.3	Acero l	Ferrítico-Perlítico
	1.3.1	Preparación y Caracterización de Muestras

INTRODUCCIÓN.....

1

CAPÍTULO 2

AUSTENIZACIÓN DE UN ACERO PERLÍTICO

2.1	Consideraciones Generales	34
-----	---------------------------	----

2.2	Modelización de la Transformación Perlita→Austenita en el	
	Calentamiento Continuo	37
2.3	Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros	
	Eutectoides. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en Función	
	de la Temperatura	44
2.4	Procedimiento de Validación del Modelo de la Transformación	
	Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo. Calentamiento	
	Interrumpido mediante Temple	48
2.5	Resultados de Validación del Modelo de la Transformación	
	Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo	53
2.6	Conclusiones	67

CAPÍTULO 3

AUSTENIZACIÓN DE ACEROS FERRÍTICOS

3.1	Consideraciones Generales	69
3.2	Modelización de la Transformación Ferrita→Austenita en el	
	Calentamiento Continuo	70
3.3	Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros	
	Ferríticos. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en Función de	
	la Temperatura	81
3.4	Resultados de Validación del Modelo de la Transformación	
	Ferrita→Austenita en el Calentamiento Continuo	83
3.5	Conclusiones	89

CAPÍTULO 4

AUSTENIZACIÓN DE UN ACERO CON MICROESTRUCTURA INICIAL FERRITA-PERLITA

4.1	Consideraciones Generales	91
4.2	Modelización de la Transformación Ferrita+Perlita→Austenita en el	
	Calentamiento Continuo. Fenómeno de Solapamiento	97

4.3	Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros	
	Ferrítico-Perlíticos. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en	
	Función de la Temperatura	103
4.4	Resultados de Validación del Modelo de la Transformación	105
	Ferrita+Perlita-Austenita en el Calentamiento Continuo	
4.5	Aplicaciones: Caracterización Dilatométrica de la Disolución de la	
	Perlita en un Acero 0.11C-0.50Mn en % en peso	113
4.6	Conclusiones	116
	۰, ۱	
CONCLUSI	ONES GENERALES	118
BIBLIOGR	AFÍA	123
APÉNDICE	A	A/1-9
APÉNDICE	B	B/1-9
APÉNDICE	C	C/1-10

.

ι,

ţ.

.

• • •

Introducción

La austenización o formación de austenita¹ durante el calentamiento de los aceros es un proceso de especial interés en estos materiales. De hecho, la gran mayoría de los tratamientos térmicos y termomecánicos aplicados a los aceros requieren su austenización. A pesar de esta consideración, hasta ahora se ha dedicado poca atención al estudio de la formación de austenita si se compara con la gran cantidad de investigaciones realizadas sobre su descomposición. Este hecho se debe a que las propiedades de los aceros dependen básicamente de las transformaciones que tienen lugar durante el enfriamiento desde el estado de austenización (1-3). Sin embargo, cualquier modificación en el tratamiento de austenización dará lugar a variaciones importantes en estas transformaciones de descomposición de la austenita. Así, el conocimiento del tamaño de grano austenítico, como parámetro capaz de caracterizar el estado de austenización, es de absoluta importancia para el desarrollo de la microestructura y las propiedades mecánicas finales de un acero (4-6).

Por otro lado, el desarrollo en la última década de microestructuras duales ferrita²martensita³ mediante austenización parcial, las cuales han dado lugar a mejoras importantes en la formabilidad de aceros bajos en carbono, han revivido también el interés por el estudio de las transformaciones que experimentan los aceros durante el calentamiento; es decir, durante su proceso de austenización.

1

¹ La austenita (γ) es una fase estable del acero a alta temperatura, a partir de 996 K para un acero con contenido en C de 0.78 % en peso, o de composición eutectoide. La austenita es una solución sólida de carbono en hierro γ y presenta una estructura cúbica centrada en las caras.

² La ferrita (α) es la fase estable del acero a temperatura ambiente. Es una solución sólida de carbono en hierro α y cristaliza en el sistema cúbico centrado en el cuerpo.

Introducción

Arnold y McWilliams en 1905 fueron los primeros en descubrir que la austenita se forma durante el calentamiento por un proceso de nucleación y de crecimiento. Portevin y Bernard (7) estudiaron el efecto de la microestructura inicial, y Jones (8) investigó la influencia de la temperatura en la velocidad de formación de austenita. Roberts y Mehl (9) revisaron los estudios de austenización realizados hasta 1943 y establecieron los mecanismos de nucleación y crecimiento en la formación de austenita a partir de agregados de ferrita y cementita⁴ en aceros eutectoides (aleación Fe-0.78 %C en peso). También demostraron la fuerte influencia de la microestructura inicial en la velocidad de formación de austenita, y comprobaron cómo, para un mismo acero, una perlita⁵ más fina transforma más rápidamente que una perlita grosera.

Varios investigadores (10,11) observaron que en el calentamiento a temperaturas superiores a la temperatura del eutectoide (996 K) de un agregado de ferrita y carburos, la transformación de la matriz ferrítica a austenita ocurre rápidamente, mientras que la disolución de los carburos en la austenita, ocurre lentamente. Hultgren (12) en aceros eutectoides y C. García de Andrés et al. (13) en aceros inoxidables martensíticos demostraron que permanecen gradientes de concentración en la austenita durante un cierto tiempo después de que las partículas de carburo se hayan disuelto. En la austenización de perlita laminar este fenómeno puede ser observado mediante ataque químico. Baeyertz lo denominó 'fantasmas de la perlita' (14). Trabajos posteriores resaltaron la importancia de los precipitados de cementita en la ferrita en el proceso de

³ La martensita es una fase metaestable del acero, denominada α ', con estructura tetragonal centrada en el cuerpo. Esta solución sólida tiene una morfología acicular a nivel microestructural, es de alta dureza y se produce en muchos aceros mediante temple (enfriamiento rápido) desde el estado de austenización.

⁴ La cementita es un compuesto intersticial de carácter metálico, de fórmula Fe₃C. Constituye una fase metaestable del acero que cristaliza en el sistema ortorrómbico.

⁵ La perlita es el producto de descomposición eutectoide del acero y está formada por ferrita (α) y cementita (Fe₃C), según la siguiente reacción de descomposición eutectoide de la austenita:

 $[\]gamma$ (0.8 %C en peso) $\leftrightarrow \alpha$ (0.02 %C en peso) + Fe₃C (6.67 %C en peso)

Microestructuralmente, presenta una morfología característica de láminas alternadas de ferrita y cementita. Puede formarse mediante transformación isotérmica o por enfriamiento lento a partir de la fase austenítica.

nucleación de la austenita (1,15,16). Todos estos autores concluyeron que el crecimiento de la austenita es controlado por la disolución de la cementita y dieron una idea de la complejidad de la transformación, pues la austenita nuclea y crece en una microestructura compuesta por dos fases, las cuales presentan grados diferentes de estabilidad.

Más recientemente, C.I. García y A.J. DeArdo (17) estudiaron el proceso de austenización mediante recocido intercrítico en aceros aleados con 1.5 % en peso de Mn y diferentes niveles de carbono, y con dos microestructuras iniciales diferentes, ferritaperlita y ferrita-carburos esferoidales. Para ambas microestructuras iniciales, la austenita se formaba preferencialmente en las fronteras de grano ferrita-ferrita. Las microestructuras formadas mediante mantenimiento isotérmico en el intercrítico y posterior temple, desarrolladas a partir de microestructuras ferrita-perlita, consistían en un volumen de martensita aproximadamente igual al volumen de perlita inicial, y capas delgadas de martensita a lo largo del grano ferrítico. En el caso de ferrita-cementita esferoidal, las microestructuras finales del recocido intercrítico estaban formadas por una red de martensita en las fronteras de grano ferrita-ferrita. El hecho de que la austenita crezca más rápidamente en dirección paralela al grano ferrítico fue explicado en base a las diferencias entre los coeficientes de difusión en la dirección perpendicular y paralela al grano ferrítico.

Speich et al. (18) dirigieron su atención a aceros con microestructuras iniciales ferrita-perlita. Usando aceros 1.5 % en peso Mn y niveles de C entre 0.06 y 0.12 % en peso, estudiaron la formación de austenita durante el calentamiento intercrítico y concluyeron que dicho proceso tiene lugar en tres etapas diferenciadas: (i) Nucleación de austenita en la intercara ferrita-perlita y crecimiento rápido de austenita en perlita, (ii) crecimiento lento de austenita en ferrita, y (iii) equilibrio del contenido de Mn de las fases ferrita y austenita. A temperaturas entre 1123 y 1173 K, el crecimiento de austenita en ferrita es controlado por la difusión del carbono en la austenita y los tiempos necesarios para completar esta etapa eran del orden de 2-9 segundos. Por el contrario, a temperaturas comprendidas entre 1013-1053 K, el crecimiento de austenita era controlado por la difusión de Mn en la ferrita, y los tiempos necesarios para

Introducción

completar este estadio eran del orden de 4-24h. La última etapa de la austenización es controlada por la difusión del Mn en la austenita, la cual es más lenta que en la ferrita. El tiempo necesario para completar el proceso era extraordinariamente largo (2000-4000 h).

En la ausencia de carburos, la austenita nuclea en las fronteras de grano ferritaferrita. La nucleación es seguida por un crecimiento rápido propio de transformaciones masivas (1).

El estudio de la formación de austenita puede ser más complicado si la microestructura inicial presenta una morfología 'acicular'. Matsuda et al. (19) estudiaron en detalle la formación de austenita en aceros martensíticos bajos en carbono. Encontraron que se formaba austenita con una morfología acicular o globular dependiendo de la velocidad de calentamiento y de la temperatura de austenización. Velocidades de calentamiento lentas y temperaturas bajas de austenización favorecían la formación de austenita acicular a partir de la martensita, mientras que, en condiciones opuestas a las ya descritas, se forma austenita con una morfología globular. Así descubrieron que la austenita nuclea en las placas de martensita y sus núcleos coalescen y adquieren una morfología globular que perdurará durante el calentamiento si éste es lo suficientemente rápido como para evitar un cambio de la austenita a una morfología acicular, o morfología intrínseca a la naturaleza de los haces martensíticos de la microestructura inicial.

Todos estos trabajos han estudiado la formación de austenita durante tratamientos isotérmicos y algunos proponen modelos analíticos y teóricos que estiman o calculan la fracción de volumen de austenita formada a una temperatura dada y tiempo transcurrido de transformación para diferentes microestructuras iniciales (1,3,11,15,18,20-27). Sin embargo, existe poca información acerca del proceso de austenización en aceros sometidos a calentamiento continuo. En este trabajo se ha empleado la dilatometría de alta resolución, la caracterización microestructural y el análisis cuantitativo con el fin de estudiar las transformaciones de fases que tienen lugar en el calentamiento continuo de aceros con diferentes composiciones y microestructuras iniciales. Asimismo, modelos

4

teóricos que describen los diferentes procesos de nucleación y crecimiento que caracterizan dichas transformaciones han sido propuestos para el cálculo de la fracción de volumen de austenita formada como una función de la temperatura alcanzada en el calentamiento continuo de aceros aleados con niveles de carbono ultra-bajo, bajo y alto, y microestructuras iniciales de ferrita, perlita y ferrita-perlita. La influencia de factores como la morfología de la perlita y la velocidad de calentamiento ha sido evaluada también en los modelos y validada experimentalmente.

Generalmente, la cinética de las transformaciones que tienen lugar isotérmicamente es descrita matemáticamente de acuerdo a la ley desarrollada por Johnson-Mehl y Avrami (28,29). En este trabajo, dicha ecuación ha sido aplicada con éxito en la modelización de las transformaciones en calentamiento continuo a partir del conocimiento de la influencia de la temperatura en la cinética de nucleación y crecimiento de las mismas.

Por otra parte, debido a que el análisis dilatométrico es una técnica empleada a menudo en el estudio de las transformaciones de fases en estado sólido de aceros, se ha propuesto un modelo que calcula la variación relativa de longitud como una función de la temperatura en el calentamiento continuo, a partir del conocimiento de la cinética de las transformaciones que tienen lugar y de los parámetros de red y coeficientes de dilatación térmica de las fases presentes.

Por último, el análisis dilatométrico de alta resolución empleado en este trabajo para estudiar las transformaciones en el calentamiento continuo de un acero aleado bajo en carbono, con una microestructura inicial de ferrita-perlita, ha permitido diferenciar con claridad el proceso de disolución de la perlita y la posterior transformación ferritaaustenita en este acero. Asimismo, se ha encontrado una fuerte influencia del espaciado interlaminar en la forma de la curva de calentamiento del acero. Este efecto está directamente relacionado con la influencia que dicho parámetro morfológico ejerce sobre la cinética de la transformación perlita-austenita. La posibilidad de estimar el rango de temperaturas en el que tiene lugar la disolución de la perlita, permitirá seleccionar la temperatura del intercrítico más adecuada para obtener una

5

microestructura dual ferrita-martensita con la mejor combinación de propiedades mecánicas en estos aceros.

,

1

.

Capítulo 1

Preparación y Caracterización de Materiales. Procedimientos Experimentales

1.1 Acero Perlítico

1.1.1 Consideraciones Generales

La perlita es un producto laminar de descomposición eutectoide propio de aceros y aleaciones no férreas como Cu-Al y Zn-Al. Posiblemente, es una de las microestructuras más conocidas en la ciencia de la metalurgia. Fue descubierta por Sorby en aceros hace más de 100 años. Sorby supuso correctamente a priori que se trataba de un microconstituyente formado por dos fases, Fe (α) y carburo de Fe.

La perlita es un constituyente muy común en la microestructura a temperatura ambiente de una amplia variedad de aceros. Proporciona una sustancial contribución a la resistencia mecánica del acero, lo cual explica el intensivo estudio al que ha sido sometido la perlita. Dicha microestructura puede formarse mediante transformación isotérmica o anisotérmica de la fase austenítica del acero. Un nódulo de perlita está compuesto de múltiples colonias, y cada colonia presenta láminas paralelas y alternadas de ferrita y cementita. La Figura 1 muestra la estructura laminar de una perlita formada isotérmicamente en un acero eutectoide (30). Diferentes colonias de perlita muestran diferentes espaciados interlaminares dependiendo del ángulo de intersección de las colonias perlíticas con el plano de pulido de la muestra. El espaciado interlaminar es uno de los parámetros morfológicos que caracterizan a la estructura perlítica. Dicho parámetro es reflejo de la cinética de difusión en el frente de la transformación austenita-perlita, y una variable microestructural importante en la determinación de las propiedades mecánicas de los aceros perlíticos.



Figura 1.- Perlita laminar formada isotérmicamente a 978 K en un acero eutectoide (30).

El espaciado interlaminar de la perlita es muy sensible a las condiciones de formación de la misma. Para un acero dado, dicho parámetro es mayor cuanto mayor es la temperatura de formación de la perlita (31). En otras palabras, el espaciado decrece cuando el grado de subenfriamiento, ΔT , por debajo de la temperatura del eutectoide (996 K en el diagrama de equilibrio Fe-C) aumenta. Zéner (32) aportó el primer análisis teórico de estas observaciones, el cual permite calcular el espaciado interlaminar de la perlita como una función del subenfriamiento.

En este trabajo, se han obtenido isotérmicamente tres diferentes morfologías de perlita a tres diferentes temperaturas en un acero eutectoide, las cuales permitirán

8

estudiar la influencia de la morfología de la perlita en la austenización por calentamiento continuo de un acero perlítico, como se mostrará en el siguiente capítulo. Dichas morfologías han sido caracterizadas mediante microscopía electrónica de barrido (MEB) y microscopía electrónica de transmisión (MET) encontrándose, como en un principio se esperaba, que a medida que disminuye la temperatura de formación de la perlita, el espaciado interlaminar es menor. Por otro lado, el espaciado interlaminar ha sido previamente calculado de acuerdo con el método teórico propuesto por Zener (32). Ello ha permitido la definición de un criterio a la hora de elegir una sistemática metalográfica fiable para la caracterización morfológica de la perlita en función de aspectos externos, como la preparación de muestras, resolución del equipo, etc. que condicionan o pueden condicionar la medida experimental de dicho parámetro.

1.1.2 Preparación y Caracterización de Muestras. Procedimientos Experimentales

Un acero eutectoide de composición Fe-0.76C-0.24Si-0.91Mn-0.013P en % en peso ha sido empleado para la obtención isotérmica de tres microestructuras completamente perlíticas con diferentes morfologías. Muestras cilíndricas de 2 mm de diámetro y 12 mm de longitud, fueron austenizadas a 1273 K durante 5 min, templadas a la temperatura de formación de la perlita y mantenidas a dicha temperatura hasta conseguir la transformación completa de la austenita. Finalmente fueron enfriadas rápidamente hasta temperatura ambiente. La Tabla I muestra las temperaturas y tiempos de mantenimiento empleados para la formación de las diferentes morfologías de perlita.

Muestra de Perlita	Temperatura de Formación, K	Tiempo de Mantenimiento, min	
MORF1	948	45	
MORF2	923	10	
MORF3	798	60	

Tabla I.- Temperaturas y tiempos de formación de perlita

Para realizar los tratamientos isotérmicos anteriormente descritos se ha empleado el sistema de calentamiento y enfriamiento de un dilatómetro de alta resolución Adamel Lhomargy DT1000, el cual permite controlar de forma automática el ciclo térmico, aplicar temples ultra-rápidos que garantizan que ninguna transformación tiene lugar entre la temperatura de austenización y la temperatura del isotérmico y medir el tiempo mínimo necesario para transformar completamente la austenita a dicha temperatura. Este equipo está dotado de sistemas de calentamiento y enfriamiento de gran versatilidad, con posibilidad de funcionamiento automático mediante la programación computarizada de ciclos térmicos en condiciones isotérmicas y anisotérmicas. Las medidas de variación de longitud de la muestra se efectúan por medio de un captador inductivo, que permite traducir los desplazamientos aplicados al núcleo de dicho captador en una tensión eléctrica proporcional a la variación de longitud. Los sistemas de registro del equipo permiten reproducir las curvas del ciclo térmico del ensayo, las curvas de variación relativa de longitud de la muestra en función de la temperatura o del tiempo, y las curvas derivadas del análisis térmico y dilatación, tanto en función de la temperatura como del tiempo.





El sistema de calentamiento consiste en un horno de radiación refrigerado por agua, formado por dos lámparas tubulares de cuarzo con filamentos de wolframio. Ambas lámparas emiten una radiación que es focalizada directamente sobre la probeta de ensayo. Con objeto de minimizar los problemas de oxidación o descarburación durante los calentamientos a altas temperaturas, las probetas se ensayan bajo condiciones de vacío entre 10^{-4} y 10^{-5} atm, o en atmosferas protectoras enrarecidas con gases inertes, generalmente He.

Para el enfriamiento, este equipo combina la acción refrigerante del aire comprimido, que es aplicado sobre las lámparas del horno, con la de un chorro de He de caudal programado, que actúa directamente sobre toda la superficie de la probeta.



Figura 3.- Curva dilatométrica dL/Lo = f(t). Formación isotérmica de perlita a 948 K.

La pequeña masa de la muestra, cilindros de 12 mm de longitud y 2 mm de diámetro, y los propios sistemas de calentamiento y enfriamiento empleados, aseguran una inercia térmica muy baja.

11

La Figura 3 muestra un ejemplo de las curvas dilatométricas registradas en el dilatómetro. La curva muestra la variación relativa de longitud de la muestra como una función del tiempo que tiene lugar como consecuencia de la formación isotérmica de perlita a 948 K en el acero eutectoide objeto de estudio en este trabajo. Cuando la curva alcanza la saturación, un valor máximo de dL/Lo aproximadamente constante, podemos concluir que la transformación austenita—perlita ha terminado. Por último, el análisis metalográfico de la muestra confirmará si la microestructura obtenida durante dicha transformación es perlita.

La microscopía electrónica de barrido (MEB) generalmente proporciona la resolución necesaria para caracterizar la perlita cuando la microscopía óptica no puede hacerlo; sin embargo, aquella técnica necesita una preparación superficial más elaborada y cuidadosa. A continuación se detalla el proceso de preparación de muestras para la caracterización de la perlita mediante MEB aconsejado por British Steel plc – Swinden Technology Centre (33).

Las muestras tratadas en el dilatómetro de alta resolución fueron cortadas por la mitad con el fin de revelar una sección intermedia de la muestra, fueron montadas en bakelita y fueron desbastadas en seis pasos consecutivos con papel de carburo de silicio de diferentes tamaños (180-1200 grid) usando agua como lubricante. Seguidamente fueron pulidas con pasta de diamante de 6, 1, y 0.25 µm de tamaño de partícula. En esta etapa del proceso de preparación se ha encontrado que tiempos prolongados (más de 5 min) de pulido con pasta de 6 µm distorsionan la microestructura de la perlita, haciendo muy difícil su observación y caracterización morfológica. Las placas de cementita, al estar soportadas por una fase dúctil (ferrita), pueden llegar a doblarse durante la deformación inducida en el proceso de pulido (34) de tal forma que, para pulidos muy largos y severos, las láminas aparecen dobladas e incluso fracturadas (Figura 4).

Tras el proceso de pulido, la muestra es atacada durante 5 min con picral 4 %, o solución de acido pícrico (4 g) y etanol (100 ml), y algunas gotas de reactivo Vilella (15 ml de ácido nitrico-30 ml de ácido hidroclórico-45 ml de glicerol). Este ataque tan severo arrastra cualquier capa de deformación inducida en la muestra durante el pulido.

Tras este primer ataque se aplica un repulido con pasta de diamante de 1 y $0.25 \ \mu m$ teniendo mucho cuidado de no presionar la probeta y no inducir nuevas capas de deformación. Posteriormente se ataca con la misma solución durante algo menos de un minuto. Finalmente, se repite el repulido y se ataca levemente.



Figura 4.- Perlita con láminas distorsionadas y algunas fracturadas por una preparación • no cuidadosa de la muestra.

El microscopio electrónico de barrido usado para la caracterización de la microestructura es un Jeol JXA-820. Las micrografías obtenidas son imágenes de electrones secundarios en todos los casos, y se ha trabajado con un potencial acelerador entre 10 y 20 kV y una distancia de trabajo entre 8 y 10 mm dependiendo de la resolución necesaria.

En el caso de la perlita formada isotérmicamente a 798 K, su morfología ha sido revelada mediante MEB y MET. Muestras delgadas para MET fueron preparadas a partir de muestras dilatométricas de 3 mm de diámetro y 12 mm de longitud. Estas fueron cortadas en discos de 100 μ m de espesor y adelgazadas mediante desbaste con papel de carburo de silicio de 800 grid hasta un espesor de 50 μ m. Finalmente, fueron electropulidas usando una solución de 5 % ácido perclórico, 15 % glicerol y 80 %

etanol a temperatura ambiente (35) y una unidad de electropulido de doble chorro a 100 V. Las muestras delgadas fueron examinadas en un microscopio electrónico de transmisión Jeol JEM-200 CX que opera a 200 kV.

1.1.3 Análisis Morfológico de la Perlita

1.1.3.1 Método Cuantitativo de Medida del Espaciado Interlaminar

Dos parámetros característicos de la perlita han sido determinados con el fin de caracterizar morfológicamente las microestructuras obtenidas mediante transformación isotérmica a diferentes temperaturas de formación: el espaciado interlaminar (σ_o) y la superficie de colonia de perlita por unidad de volumen ($S_V^{P/P}$).

 σ_o es una variable microestructural difícil de determinar debido a las variaciones en el espaciado de las diferentes colonias de perlita y a las diferentes orientaciones de las láminas con el plano de corte metalográfico. Cuando el plano de intersección es perpendicular a la lámina, el espaciado interlaminar real de la colonia puede ser medido directamente sobre la muestra; pero, cuando el plano de intersección no es perpendicular con respecto a la lámina sino que se acerca a una orientación paralela a la misma, entonces el espaciado interlaminar aparente aumenta de forma significativa. Underwood (36) recomienda como mejor método para determinar σ_o , calcular el espaciado interlaminar real medio ($\overline{\sigma_t}$), o distancia perpendicular entre dos láminas consecutivas de cementita o ferrita, a partir de la estimación del espaciado interlaminar aleatorio medio ($\overline{\sigma_r}$).

Para medir $\overline{\sigma_r}$ se superpone una rejilla circular de diametro d_c sobre una micrografía de la perlita realizada con unos aumentos M y se cuenta el número de intersecciones de láminas de cementita con la circunferencia (Figura 5). Este procedimiento se repite en seis campos diferentes de cada micrografía y en 10 micrografías diferentes de cada muestra elegidas aleatoriamente. El espaciado interlaminar aleatorio medio vendría dado por la siguiente fórmula:

14

$$\overline{\sigma_r} = \frac{\pi d_c / M}{n}$$
[1]

donde *n* sería el número de láminas de cementita intersectadas aleatoriamente por una circunferencia de longitud $\pi d_c / M$.



Figura 5.- Esquema que ilustra la intersección de una colonia de perlita y una rejilla circular para la estimación del espaciado interlaminar.

Saltykov (37) demostró que para la perlita con un espaciado interlaminar constante en cada colonia, el espaciado interlaminar real medio estaría relacionado con el espaciado interlaminar aleatorio medio de la siguiente forma:

$$\overline{\sigma_t} = \frac{\overline{\sigma_r}}{2}$$
[2]

Luego, el valor del espaciado interlaminar que caracterizará las morfologías de perlita en este trabajo será el espaciado interlaminar real medio calculado de acuerdo al procedimiento anteriormente descrito, y que denominaremos a lo largo de estas páginas como σ_o con el fin de simplificar la nomenclatura.

La superficie de colonia de perlita por unidad de volumen se ha medido mediante el mismo método de conteo utilizado para la medida del espaciado interlaminar, pero, en este caso, se cuenta el número de fronteras de colonia de perlita intersectadas (n) por la rejilla circular de diametro d_c .

La superficie de colonia de perlita por unidad de volumen se calcularía como sigue,

$$S_V^{P/P} = \frac{2nM}{\pi d_{\pi}}$$

donde M representa los aumentos.



Figura 6.- Octaedro truncado.

Aproximando la forma de una colonia de perlita a un octaedro truncado (Figura 6), la longitud de borde de colonia de perlita por unidad de volumen se calcularía como sigue (38):

$$a^P = \frac{2.367}{S_V^{P+P}}$$

Como para el caso del espaciado interlaminar, el parámetro $S_V^{P/P}$ fue medido en seis campos diferentes de cada micrografía y en 10 micrografías diferentes de cada muestra elegidas aleatoriamente.

[4]

[3]

1.1.3.2 Cinética de Crecimiento de la Perlita. Cálculo del Espaciado Interlaminar

La transformación austenita-perlita es un claro ejemplo de transformación difusional, de nucleación y crecimiento. La perlita nuclea en los lugares preferentes de la austenita, como las fronteras de grano austenítico, y los núcleos crecen hasta que se pinzan entre ellos. El proceso depende del tiempo y de la temperatura y es controlado por la difusividad de los átomos susceptibles de difundir.

Zener (32) desarrolló un modelo que explica la formación de perlita en austenita y que permite calcular el espaciado interlaminar como una función de la temperatura de formación. Según Zener, la forma en la que un grano de ferrita o cementita crece isotérmicamente depende principalmente de si la temperatura de formación es superior o inferior a la temperatura del eutectoide, denominada T_e en el diagrama de la Figura 7.



Figura 7.- Diagrama de fases Fe-C.

Si un grano de ferrita crece a una temperatura por encima del eutectoide (región $\alpha + \gamma$ en el diagrama de equilibrio), la concentración en carbono de la austenita que rodea al grano de ferrita vendría dada por la línea de solubilidad GS (Figura 7), la cual indica que dicha concentración no es suficientemente alta para que la reacción

eutectoide γ (0.8 %C) $\leftrightarrow \alpha$ (0.02 %C) + Fe₃C (6.67 %C) tenga lugar y se forme perlita; los granos de ferrita, entonces crecerán indefinidamente hasta pinzarse entre ellos (39). Sin embargo, para una temperatura menor que la temperatura T_e (Figura 7), la composición en carbono de la austenita tras la formación de ferrita evolucionará entre las líneas imaginarias de solubilidad SE' y SG'. Cuando la composición de la austenita alcance la línea de solubilidad SE' comenzará la precipitación de cementita y simultánea y sucesivamente la de ferrita. La composición de la austenita en la intercara ferrita-austenita vendrá dada entonces por la línea SG' del diagrama de la Figura 7. Igualmente ocurre si un grano de cementita crece en la región γ + Fe₃C, éste puede crecer indefinidamente hasta pinzarse con otros granos vecinos, pero no hay transformación eutectoide. Para aceros hipereutectoides y para isotérmicos a temperaturas menores que T_{e_3} tras la formación de cementita, el proceso de transformación eutectoide ocurrirá de la misma forma que se ha explicado anteriormente.



Figura 8.- Modelo de crecimiento de perlita.

Como cualquier reacción termodinámica, la intercara perlita-austenita avanzará si se reduce la energía libre del sistema. Es decir, la reducción en energía libre durante la transformación debe ser mayor que la energía necesaria para formar una intercara ferrita-cementita. Suponiendo ambas energías iguales, Zener (32) calculó un espaciado interlaminar crítico de una perlita formada a la temperatura T, inferior a la temperatura del eutectoide T_e , para el cual la velocidad de crecimiento es nula.

Para expresar dicha condición matemáticamente, Zener diseñó el modelo representado esquemáticamente en la Figura 8, en el cual un nódulo de perlita de espaciado interlaminar σ_c avanza en la fase austenita, y consideró una región de volumen $\sigma_c Wx$ que incluye una lámina de ferrita y otra de cementita donde la variación de energía libre asociada al crecimiento de la perlita es nula. Cuando el nódulo de perlita avanza una distancia dx, el volumen de la austenita transformada en la región considerada sería $\sigma_c Wdx$, y la masa de austenita transformada sería $\rho\sigma_c Wdx$, donde ρ es la densidad. La energía libre disponible para la formación de una nueva intercara ferrita-cementita sería:

Energía libre disponible=
$$Q \frac{T_e - T}{T_e} \rho \sigma_c W dx$$
 [5]

donde Q es el calor de transformación por unidad de masa y T_e es la temperatura del eutectoide. Teniendo en cuenta que el incremento en el área total de intercara en la transformación sería W2dx y que $\sigma_{\alpha\theta}$ es la energía superficial por unidad de área, el incremento en energía de intercara vendría dado por:

Incremento de energía de intercara=
$$2\sigma_{\alpha\theta}Wdx$$
 [6]

Igualando la energía libre disponible al incremento de energía de intercara se obtendría una ecuación de la forma:

$$Q\frac{\underline{T_e}-\underline{T}}{T_e}\rho\sigma_c = 2\sigma_{\alpha\theta}$$
^[7]

La solución de esta ecuación para el espaciado interlaminar crítico sería:

$$\sigma_c = \frac{2T_e \sigma_{\alpha\theta}}{\rho Q(T_e - T)}$$
[8]

Por otro lado, Hillert (40,41) propuso un modelo para el cálculo de la velocidad de crecimiento de la perlita en un sistema Fe-C y explicó el papel de los elementos aleantes en la transformación. La velocidad de crecimiento de la perlita en dicho modelo es controlada bien por un mecanismo de difusión en volumen, o por un mecanismo de difusión en intercara dependiendo de la temperatura de formación isotérmica de la perlita.

Cuando el crecimiento de la perlita es controlado por la difusión en volumen de átomos en la austenita, al otro lado de la intercara perlita-austenita, la difusión del carbono juega un papel más importante que la difusión de los elementos aleantes, debido a que estos últimos presentan una difusividad en la austenita mucho menor que la del carbono. Los elementos aleantes no podrán difundir largas distancias durante la reacción y se acumulará una alta concentración de elementos sustitucionales en la intercara a medida que ésta avanza. En tal caso, la condición de equilibrio en la intercara perlita-austenita se denomina de paraequilibrio o de equilibrio local con *partición* despreciable. La velocidad de crecimiento se expresa entonces como sigue (40):

$$G = K_{v} \frac{1}{\sigma_{o}} \left(1 - \frac{\sigma_{c}}{\sigma_{o}} \right)$$
[9]

donde K_v tiene un valor constante a una temperatura de formación dada, pero depende de factores tales como el coeficiente de difusión en volumen del carbono y las composiciones de carbono de equilibrio en la intercara, σ_o es el espaciado interlaminar y σ_c es el espaciado crítico al cual la velocidad de crecimiento es cero.

A temperaturas de formación más bajas, la difusividad en la intercara de los elementos sustitucionales puede llegar a ser comparable a la difusividad en volumen del carbono, los elementos sustitucionales pueden redistribuirse durante el crecimiento de la

perlita y el mecanismo controlador de la transformación pasa a ser la difusión de dichos elementos a lo largo de la intercara perlita-austenita. La velocidad de crecimiento en tal caso se expresa de la forma:

$$G = K_b \frac{1}{\sigma_o^2} \left(1 - \frac{\sigma_c}{\sigma_o} \right)$$
[10]

La principal diferencia en las expresiones [9] y [10] es que la velocidad de crecimiento es inversamente proporcional al cuadrado del espaciado interlaminar para un proceso controlado por difusión en intercara [10], e inversamente proporcional al espaciado interlaminar para un proceso controlado por difusión en volumen, como en la ecuación [9].

Supongamos inicialmente que el crecimiento de la perlita es controlado por el mecanismo de difusión en volumen. Cualquier σ_o mayor que σ_c satisface la ecuación [9] por hacer positiva la velocidad de crecimiento. En dicha ecuación, G y σ_o son factores desconocidos en principio para una temperatura de formación dada. Consecuentemente, esta expresión no predice el valor del espaciado laminar de la perlita a una temperatura de formación dada. Sin embargo, Zener (32) sugiere que debe haber algún mecanismo de autorregulación por el cual el espaciado interlaminar de la perlita formada sería próximo al valor que hace máxima la velocidad de crecimiento. Si derivamos e igualamos a cero la ecuación [9], se obtiene según este criterio que:

$$\sigma_o = 2\sigma_c \tag{[11]}$$

Sustituyendo en la ecuación [11] el valor de σ_c de la ecuación [8], se concluye:

$$\sigma_o = \frac{4T_e \sigma_{\alpha\theta}}{\rho Q(T_e - T)}$$
[12]

Takahashi (42) propuso en su tesis la siguiente relación empírica para el espaciado interlaminar como una función de la temperatura de formación y de la composición

- - - -

química de la aleación, la cual fue obtenida a partir de medidas del espaciado interlaminar en aleaciones Fe-C, Fe-C-Cr, Fe-C-Ni y Fe-C-Mn:

$$\log(\sigma_o) = -2.2358 + 0.0986Mn - 0.0543Cr + 0.0337Ni - \log\left(\frac{T_e - T}{T_e}\right)$$
[13]

donde σ_0 viene dado en μ m y el contenido en *Mn*, *Cr* y *Ni* en % en peso.

Sustituyendo en la ecuación [13] el valor de σ_o de la ecuación [12] se obtiene:

$$log\left(\frac{4\sigma_{\alpha\theta}}{\rho Q}\right) = -2.2358 + 0.0986Mn - 0.0543Cr + 0.0337Ni$$
 [14]

Esta ecuación permite calcular el calor de transformación por unidad de volumen (ρQ) y la energía de intercara ferrita-cementita, parámetros desconocidos hasta ahora en la ecuación [12],

Utilizando la ecuación [14] para la composición del acero objeto de este estudio y considerando un valor aproximado de la temperatura del eutectoide T_e de 1000 K, cuando el crecimiento es controlado por un mecanismo de difusión en volumen, el espaciado interlaminar varía con la temperatura de formación de acuerdo con la siguiente función:

$$\sigma_o = \frac{7.1437}{(1000 - T)} \ \mu \text{m} \tag{15}$$

Si el mismo razonamiento es aplicado para el supuesto de un crecimiento de la perlita controlado por un mecanismo de difusión en intercara, se obtiene una expresión para el espaciado interlaminar de la forma:

$$\sigma_o = \frac{2.6789}{(1000 - T)} \,\mu\text{m}$$
[16]

22

La Figura 9 muestra un ejemplo de las micrografías electrónicas de barrido y transmisión sobre las cuales se ha realizado la caracterización de las diferentes morfologías de perlita obtenidas isotérmicamente.

Muestra de Perlita	Temperatura de Formación, K	Técnica de Caracterización	σ₀, μ m	$S_{v}^{P/P}$, mm ⁻¹	<i>a^P</i> , μm
MORF1	948	MEB	0.20±0.03	581±86	4.16±0.70
MORF2	923	MEB	0.08±0.01	1399±273	1.76±0.34
MORF3	798	MEB MET	0.10±0.01 0.06±0.01	1432 ±6 0	1.65±0.07

Tabla II.- Caracterización morfógica de la perlita.

La Tabla II muestra los parámetros que caracterizan las morfologías de las perlitas formadas isotérmicamente a las tres diferentes temperaturas de ensayo seleccionadas, junto con los correspondientes errores o desviaciones standard de cada medida. La caracterización se ha realizado sobre micrografías electrónicas de barrido en todos los casos y también de transmisión para la muestra MORF3. El método cuantitativo de medida aplicado para la caracterización ha sido el descrito en el apartado 1.1.3.1 de este capítulo.

En relación con el espaciado interlaminar σ_o , los resultados experimentales obtenidos sobre las micrografías MEB de las tres muestras que se indican en esta tabla no mantienen la tendencia normal de variación por la cual el espaciado interlaminar de la perlita disminuye al disminuir la temperatura T de formación de perlita. En efecto, la medida del espaciado interlaminar obtenida sobre micrografías MEB de la muestra MORF3, correspondiente a una temperatura de formación de 798 K, es superior a la obtenida para la muestra MORF2 que corresponde a una temperatura de formación de 923 K. En principio, esta anomalía parece estar justificada por limitaciones propias de la técnica experimental de caracterización empleada, en especial las derivadas de la preparación superficial. Con objeto de comprobar estos resultados experimentales, se han efectuado medidas adicionales del espaciado interlaminar sobre micrografías MET de la muestra MORF3 y se han calculado los espaciados interlaminares de las tres muestras según las teorías desarrolladas anteriormente.



(c) MORF3. MEB

(d) MORF3. MET



La Figura 10 representa las curvas de variación del espaciado interlaminar en función del subenfriamiento, obtenidas bajo la consideración de crecimiento controlado por difusión en volumen o en intercara a traves de las ecuaciones [15] y [16], respectivamente. Asimismo, en esta misma figura se representan también los valores experimentales del espaciado interlaminar de la perlita caracterizados mediante MEB y MET.



Figura 10.- Variación del espaciado interlaminar con el subenfriamiento.

Del análisis de los resultados recogidos en esta figura se desprende que, para todo el rango de temperaturas estudiado en este caso, el crecimiento de la perlita está controlado principalmente por la difusión en volumen del carbono en la austenita. En efecto, los resultados experimentales se ajustan claramente a la curva correspondiente al mecanismo de difusión en volumen.

Por otra parte, el resultado del espaciado interlaminar de la muestra MORF3, obtenido sobre imágenes MET de campo claro, Figura 9(d), se ajusta mucho mejor a dicha curva que el obtenido por MEB. Esto demuestra que, para espaciados interlaminares de perlita menores de 0.08 μ m, la carcterización morfológica por métodos metalográficos de contraste por relieve es prácticamente imposible debido a las dificultades propias de la preparación superficial de las muestras. Para una medida fiable de espaciados interlaminares más finos, es necesario emplear las técnicas de contraste por relieve con MEB. En este

sentido cabe destacar que las micrografías MEB de la muestra MORF3, muestran colonias de perlita con el relieve deteriorado por el proceso de preparación superficial (Figura 9(c)). Las láminas de cementita (láminas brillantes en las micrografías MEB de dicha figura) se muestran fragmentadas en muchas zonas de las colonias perlíticas.

Según la ecuación [1] del método cuantitativo de medida, el espaciado interlaminar es inversamente proporcional al número de intersecciones (*n*) de las láminas de cementita con la circunferencia de la rejilla. Por consiguiente, cuando las láminas de cementita están fragmentadas, el número de intersecciones es infravalorado en la cuantificación y la medida del espaciado interlaminar resulta sobrevalorada. El resultado de 0.10 µm obtenido sobre micrografías MEB para el espaciado interlaminar de la muestra MORF3, queda así invalidado y es sustituido en este trabajo por el de 0.06 µm obtenido sobre imágenes MET. Como se mencionaba anteriormente, este valor se ajusta mucho mejor a la curva obtenida teóricamente y, además, la técnica de caracterización por MET no plantea ninguna dificultad operativa de preparación que pueda poner en duda la fiabilidad de las medidas realizadas.

De todo lo anterior se concluye que una microestructura completamente perlítica ha sido obtenida a tres temperaturas diferentes de transformación en un acero eutectoide aleado con Mn. La morfología de la perlita ha sido revelada mediante MEB, y MET para la menor temperatura de formación. El espaciado interlaminar de la perlita ha sido mediante un método cuantitativo de conteo de intersecciones usando una rejilla circular, encontrándose que el espaciado interlaminar de una microestructura perlítica formada isotérmicamente disminuye a medida que el subenfriamiento aumenta hasta alcanzar un valor mínimo o límite de 0.06 µm aproximadamente.

Se ha podido comprobar cómo para espaciados interlaminares menores de 0.08 μ m, una caracterización de la perlita mediante un contraste de relieve y MEB puede llevar a conclusiones y medidas erróneas del espaciado interlaminar. Las deformaciones inducidas durante la preparación metalográfica de una perlita tan fina destruyen las láminas de cementita y hacen imposible una caracterización fiable de la muestra. En tal caso se aconseja medir el espaciado interlaminar mediante MET.
Por otro lado, el modelo propuesto por Zener y Hillert para el cálculo de la variación del espaciado interlaminar como una función de la temperatura, así como la ecuación empírica de Takahashi para el cálculo de los parámetros termodinámicos de la reacción eutectoide, han sido validados experimentalmente a tres temperaturas diferentes de transformación en el mismo acero, encontrándose un gran acuerdo entre los valores experimentales y los calculados, cuando en el modelo el crecimiento es controlado por la difusión de volumen del carbono en la austenita.

1.2 Aceros Ferríticos

1.2.1 Caracterización de Materiales

La Tabla III muestra la composición completa del hierro Armco y de los tres aceros ultra bajos en C y aleados con Mn (0.25-0.50 % en peso), usados para la validación experimental de los modelos diseñados en este trabajo para estudiar la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ y para calcular las curvas dilatométricas durante el proceso de calentamiento de estos aceros en condiciones de quasi-equilibrio.

Aceros	С	Mn	Si	N	Al	P	Cr	Ni
Armco	0.002	0.05		0.004	-	0.003	-	-
C-0.25Mn	0.010	0.25	0.028	0.003	0.057	0.016	0.014	0.022
C-0.37Mn	0.010	0.37	0.028	0.002	0.069	0.016	0.016	0.022
C-0.50Mn	0.010	0.50	0.028	0.004	0.046	0.015	0.012	0.020

Tabla III.	- Composición	química é	en % en peso)
------------	---------------	-----------	--------------	---

Las microestructuras iniciales fueron preparadas metalográficamente mediante desbaste, pulido y, finalmente, ataque químico. El reactivo usado generalmente para revelar la ferrita es Nital 2 %, mezcla de 98 ml de ácido nítrico y 2 ml de metanol. La Figura 11 muestra un ejemplo de la microestructura inicial del acero Armco usado para la validación experimental del modelo de austenización de aceros ferríticos.



Figura 11.- Microestructura completamente ferrítica. Acero Armco.

El parámetro que caracteriza la microestructura inicial de estos aceros es el tamaño de grano ferrítico. Dicho parámetro, junto a la composición química del acero, son los valores que predeterminan y condicionan la cinética de la transformación ferritaaustenita.

La medida del tamaño de grano ferrítico se expresa como el diámetro medio del grano de ferrita. Éste es medido a partir del método de las intercepciones (36). Para ello sobre una micrografía óptica de la muestra se superpone una rejilla compuesta de diez líneas de longitud L_i y orientadas aleatoriamente como muestra la Figura 12. El diámetro de grano ferrítico d_i en la orientación de la línea *i* se calcula a partir del número de granos de ferrita interceptados N_i por la línea de longitud L_i como sigue,

$$d_i = \frac{L_i}{N_i M} \tag{17}$$

donde M son los aumentos de la micrografía sobre la que se mide el diámetro de grano.

El procedimiento se repite para diez líneas superpuestas en diferentes direcciones y para diez micrografías diferentes. De todas las medidas se calcula un diámetro de grano medio y una desviación standard de la media como error de la medida.



Figura 12.- Método de las intercepciones para la medida del tamaño de grano ferrítico.

Muestras dilatométricas de 2 mm de diámetro y 12 mm de longitud fueron calentadas desde temperatura ambiente a 1273 K a una velocidad de quasi-equilibrio (0.05 K/s) en el sistema de calentamiento/enfriamiento del dilatómetro DT1000 descrito en este capítulo. Tras una austenización de 5 min, las muestras fueron enfriadas a una velocidad de 0.5 K/s. Se han realizado tres ensayos repetidos para cada acero con el fin de establecer una curva dilatométrica de calentamiento promedio. Esto permitirá validar experimentalmente, con mayor rigor y fiabilidad, las curvas dilatométricas calculadas en base al modelo de austenización de aceros ferríticos diseñado en este trabajo.

1.3 Acero Ferrítico-Perlítico

1.3.1 Preparación y Caracterización de Muestras

La composición química del acero estudiado se muestra en la Tabla IV. Lingotes semi-laminados de 36 mm de espesor fueron calentados a 1523 K durante 15 min, posteriormente laminados en caliente hasta 6 mm' de espesor en varios pasos, y finalmente enfriados al aire hasta temperatura ambiente. Un grupo de muestras fueron mecanizadas a partir de este material y denominadas 'Totalmente Laminadas (TL)'. Un segundo grupo de muestras fueron mecanizadas directamente desde los lingotes semi-laminados de 36 mm de espesor, y se denominaron 'Semi Laminadas (SL)'.

En las Figura 13.a y 13.b se muestran las microestructuras resultantes de ambos procesos de laminación. Ambas microestructuras están formadas por una fracción de volumen de perlita similar (≈ 10 % en perlita); sin embargo, los parámetros morfológicos de la perlita en las muestras TL y SL son diferentes (ver Tabla V).

Tabla IV.- Composición química del acero (% en peso)

С	Mn	Si	Cr	Ni
0.11	0.50	0.03	0.01	0.02

Con el fin de obtener nuevas microestructuras con morfologías diferentes de perlita y estudiar así la influencia del espaciado interlaminar de la perlita en el proceso de disolución de la misma, algunas muestras, denominadas REC1-3 en la Tabla V, fueron calentadas a 1273 K durante 60 s y enfriadas a las velocidades de 0.05, 0.1 y 0.5 K/s, respectivamente.

Las muestras fueron desbastadas, pulidas en la forma habitual hasta 1 µm con pasta de diamante y atacadas químicamente con el reactivo Nital-2% para revelar mediante microscopía óptica las microestructuras de ferrita-perlita que se muestran en las Figuras 13(a)-(e). Para la caracterización de la perlita mediante microscopía electrónica de barrido, las muestras fueron preparadas por el método de ataque y repulido aconsejado por British Steel plc (33) y descrito anteriormente en este trabajo. El microscopio electrónico de barrido usado para la caracterización de la microestructura es un Jeol JXA-820.

La fracción de volumen de perlita V_{Po} presente en las diferentes microestructuras ha sido determinada metalográficamente mediante el método de conteo por puntos de Underwood (36). Sobre una micrografía óptica se superpone de forma aleatoria una rejilla cuadrada de 81 puntos, de tal forma que la fracción de volumen de perlita presente en la muestra sería:

$$V_{P_o} = \frac{n}{n_t}$$
[18]

donde *n* es el número de puntos de la rejilla superpuestos sobre la perlita presente en la microestructura y n_t es el número total de puntos de la rejilla. Un ejemplo de las micrografías empleadas en la cuantificación de V_{Po} se muestra en la Figura 13 para cada una de las microestructuras empleadas.

Muestra	V _{Po}	$\sigma_o, \mu \mathbf{m}$	$S_v^{P/P}$, mm ⁻¹	<i>a^P</i> , μm	
TL	0.11±0.04	0.15±0.02	959±154	2.5±0.5	
SL	0.09±0.03	0.20±0.02	592±118	4.1±0.8	
REC1	0.10±0.03	0.19±0.02	864±144	2.8±0.5	
REC2	0.11±0.03	0.25±0.04	704±93	3.4±0.4	
REC3	0.11±0.04	0.29±0.04	871±106	2.8±0.3	

Tabla V.- Caracterización morfológica de la perlita presente en las microestructuras de laminado y recocido

La Figura 14 muestra algunas de las micrografías electrónicas de barrido sobre las que se han caracterizado las cinco morfologías diferentes de perlita consideradas en este estudio. El espaciado interlaminar σ_o y la superficie de intercara de colonia de perlita $S_v^{P/P}$ han sido determinados mediante sendos procedimientos de intersección descritos anteriormente. Ambos parámetros morfológicos de la perlita son mostrados también en la Tabla V.

Con objeto de analizar el comportamiento dilatométrico de las cinco muestras con diferente morfología de perlita que se indican en dicha Tabla, probetas dilatométricas cilíndricas de 2 mm de diámetro y 12 mm de longitud de cada una de estas muestras fueron calentadas a una velocidad constante de 0.05 K/s en una atmósfera protectora de vacío de 10^{-4} - 10^{-5} atm en un dilatómetro de alta resolución Adamel Lhomargy DT1000.

Sobre este tema, es conveniente puntualizar por último que el modelo teórico propuesto para el cálculo de la curva dilatométrica de calentamiento de una acero ferrítico-perlítico, será validado experimentalmente a partir de la curva de calentamiento promedio de once ensayos sobre muestras de microestructura inicial TL, realizadas a una velocidad de 0.05 K/s.





(b) SL



(c) REC1

(d) REC2



(e) REC3





Figura 14.- Micrografías electrónicas de barrido sobre las que se han caracterizado las cinco morfologías diferentes de perlita consideradas en este estudio.

Capítulo 2

Austenización de un Acero Perlítico

2.1 Consideraciones Generales

La formación de austenita a partir de un agregado de ferrita y cementita (perlita) tiene lugar mediante un proceso de nucleación y crecimiento. Los factores microestructurales que afectan a la localización de los primeros núcleos de austenita y que determinan la velocidad de nucleación y crecimiento de la misma en agregados de ferrita y cementita son necesariamente distintos a aquéllos que controlan la transformación inversa, es decir, la formación de perlita a partir de austenita. En el caso de la austenización de la perlita, el factor microestructural más importante a tener en consideración es el grado de dispersión de carburos. Para el caso de la perlita laminar, el espaciado interlaminar es una medida de la dispersión de los carburos y, en agregados de ferrita y carburos esferoidales, el número y tamaño de los carburos serían los factores microestructurales más determinantes en la transformación.

La nucleación de la austenita en una microestructura perlítica tiene lugar preferentemente en la intersección de las colonias de perlita (1). No existe evidencia alguna de nucleación de austenita en la superficie interlaminar a pesar de la gran superficie por unidad de área que dicha superficie representa en la microestructura.

Una vez que la austenita ha nucleado en la perlita, su crecimiento es controlado por la difusión del carbono en la austenita, y la distancia efectiva de difusión es aproximadamente igual al espaciado interlaminar de la perlita (9). Como en el caso de la transformación inversa, el proceso de crecimiento puede ser controlado, o bien por la difusión en volumen de carbono en la austenita o por la difusión de aleantes sustitucionales a lo largo de la intercara. Debido a la corta distancia efectiva de difusión del proceso, la velocidad de crecimiento de la austenita en perlita fina será previsiblemente muy alta, y tenderá a disminuir para perlitas con espaciados interlaminares mayores.



Figura 15.- Geometría de difusión para la disolución de la perlita de un acero eutectoide (1).

El frente de crecimiento de la austenita no es planar, la austenita crece más rápidamente que se disuelven los carburos, por lo que la intercara α/γ avanza con una alta curvatura (Figura 15). Algunos carburos pueden seguir presentes en la microestructura una vez que la austenización se ha completado; estos carburos residuales se disolverán eventualmente o esfereorizarán dependiendo del contenido en carbono del acero y de la temperatura de ensayo.

Las cinéticas de transformación completa de un acero son tradicionalmente caracterizadas mediante los diagramas TTT (tiempo-temperatura-transformación). Estos diagramas representan las fracciones de volumen de las diferentes fases y microconstituyentes formados por descomposición isotérmica de la austenita en función de la temperatura y del tiempo de mantenimiento. Durante el proceso de descomposición isotérmica de la austenita en aceros, la fuerza motriz de una transformación aumenta cuando la temperatura de reacción disminuye, y la movilidad

de los átomos disminuye con la temperatura. De ahí la forma de C tan característica de las curvas TTT, indicada como ejemplo en la curva discontinua de la Figura 16. En el caso de la austenización, la fuerza motriz de la transformación y la movilidad de los átomos aumenta con la temperatura de reacción; como resultado, el tiempo requerido para la formación de austenita decrece de forma monótona con la temperatura, como puede apreciarse en la curva continua de la Figura 16.



Figura 16.- Curvas TTT para las transformaciones $\gamma \rightarrow \alpha$ y $\alpha \rightarrow \gamma$.

Para toda fase, cuya formación se produce a través de procesos de nucleación y crecimiento, la fracción de volumen formada puede ser calculada a una temperatura T y tras un tiempo t de mantenimiento isotérmico mediante la ecuación de Avrami (29):

$$x = 1 - \exp\left(-Kt^n\right)$$
^[19]

donde x representa la fracción de volumen transformada, K es una constante que depende de la temperatura, t es el tiempo y n es una constante que caracteriza la cinética de la transformación.

Esta ecuación es generalmente usada para modelizar transformaciones bajo condiciones isotérmicas, sin embargo en este trabajo esta ecuación ha sido aplicada, con éxito, para la modelización de la transformación perlita-austenita durante calentamiento continuo en un acero de composición Fe-0.76C-0.24Si-0.91Mn-0.013P en % en peso y con una microestructura inicial completamente perlítica. La adaptación de la ecuación de Avrami al estudio de la austenización de la perlita en condiciones anisotérmicas, de calentamiento continuo, se ha realizado en base al conocimiento previo de la influencia de la temperatura sobre la cinética de nucleación y crecimiento de la austenita.

Por otro lado, debido a que el análisis dilatométrico es una de las técnicas más empleadas en el estudio de las transformaciones de fases en aceros, se ha propuesto un modelo que permita calcular la variación relativa de longitud como una función de la temperatura en el calentamiento continuo. Dicho modelo se ha diseñado a partir del conocimiento de la cinética de la transformación perlita-austenita y de los parámetros de red y coeficientes de dilatación térmica de las fases involucradas.

Ambos modelos han sido validados experimentalmente para las tres morfologías de perlita indicadas en la Tabla II y para tres velocidades de calentamiento diferentes. A partir de los resultados de la validación experimental del primer modelo, se ha propuesto una expresión para el cálculo de la velocidad de nucleación y crecimiento de la austenita como una función de la morfología inicial de la perlita y de la velocidad de calentamiento. Esta expresión, además de ser una aportación original de este trabajo, representa un avance de especial interés en el estudio del proceso de austenización de los aceros, al permitir calcular factores determinantes de la cinética de formación de la austenita en condiciones anisotérmicas.

2.2 Modelización de la Transformación Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo

Como se dijo anteriormente, toda transformación que se desarrolla por procesos de nucleación y crecimiento puede ser descrita, en general, por la ecuación de Avrami (29) que, para la transformación de austenización, se expresa como:

$$V_{\gamma} = 1 - \exp\left(-Kt^{n}\right)$$
^[20]

donde V_{γ} representa la fracción de volumen de austenita formada, K es una constante que depende de la temperatura, t es el tiempo y n es una constante que caracteriza la cinética de la transformación. Los valores de K y n pueden ser obtenidos mediante un análisis de regresión, usando la ecuación siguiente:

$$\log\left[\ln\left(\frac{1}{1-V_{\gamma}}\right)\right] = \log K + n\log t$$
[21]

No obstante, considerar directamente un valor de n=4 significaría que la velocidad de nucleación, N, y la velocidad de crecimiento, G, se suponen constantes en el tiempo y funciones de la temperatura (43) y que el proceso de nucleación no alcanza la saturación (3). Esto daría lugar a la siguiente expresión de la fracción de volumen de austenita transformada de:

$$V_{\gamma} = 1 - exp\left(-Kt^{4}\right) \qquad . \tag{22}$$

donde

 $K(T) = \frac{\pi}{3} N(T) G^{3}(T)$ [23]

Roosz et al (3) estudiaron la dependencia de N y G con la temperatura y la microestructura inicial para un acero puramente perlítico, y propusieron una dependencia de la temperatura para N y G de la forma:

$$\dot{N} = f_N \exp\left(\frac{-Q_N}{k\Delta T}\right) \qquad \frac{1}{mm^3 s}$$
[24]

$$G = f_G \exp\left(\frac{Q_G}{k\Delta T}\right) \qquad \frac{mm}{s}$$
[25]

donde Q_N y Q_G son las energías de activación para la nucleación y el crecimiento, respectivamente, k es la constante de Boltzmann, y f_N y f_G son las funciones que representarían la influencia de la morfología de la perlita en la velocidad de nucleación y de crecimiento, respectivamente.

La austenita, en el caso que nos ocupa, sólo puede nuclear en una intercara ferritacementita. Existen tres diferentes intercaras ferrita-cementita en un acero puramente perlítico:

A.-la intercara de las placas de ferrita y cementita en una colonia de perlita

B.-la línea de intersección de las placas con la superficie de colonia de perlita

C.-los puntos de intersección de las placas con los bordes de colonia de perlita.

Estos lugares son representados en la Figura 17(a).

Por otra parte, varios autores (1,3,11) estimaron que la nucleación de la austenita en una microestructura perlítica es más efectiva en los bordes de las colonias de perlita (modalidad C) que una nucleación en la intersección de las placas de ferrita y cementita con la superficie de las colonias de perlita (modalidad B). De esta forma, la nucleación de la austenita en la perlita ocurre preferencialmente en los puntos de intersección de las placas con los bordes de colonia de perlita o lugares tipo C. Además, como ya fue señalado, no hay evidencia experimental de su nucleación en las superficies interlaminares (modalidad A), a pesar de la gran superficie por unidad de volumen que éstas representan en la microsestructura (11).

Si se consideran las colonias de perlita con una forma geométrica de octaedros truncados (Figura 17(b)), el número de lugares de nucleación del tipo C por unidad de

volumen, N_C , se calcularía a partir de la longitud de borde de colonia de perlita a^P y del espaciado interlaminar σ_o como sigue:

$$N_C = \frac{1}{\left(a^P\right)^2 \sigma_o} \quad \frac{1}{\mathrm{mm}^3}$$
[26]

Roosz et al. (3) consideraron que la función f_N en la ecuación [24] era de la forma:

$$f_N = K_N N_C^i \tag{27}$$

donde K_N es una constante de proporcionalidad para dicha función. Estos autores encontraron que para las morfologías estudiadas, los valores experimentales estaban mejor descritos para un valor de *i*=2.



Figura 17.- Posibles lugares de nucleación de la austenita en la perlita.

En tal caso, la ecuación [24] se expresaría como sigue,

$$\dot{N} = K_N \left[\frac{1}{(a^p)^2 \sigma_o} \right]^2 \exp\left(\frac{-Q_N}{k\Delta T}\right) - \frac{1}{mm^3 s}$$
[28]

A partir de datos experimentales, Roosz et al. (3) calcularon los valores de K_N y Q_N que convierten la expresión [28] en:

$$N = \frac{1.378 \times 10^{-12}}{\left[\left(a^{p}\right)^{2} \sigma_{o}\right]^{2}} \exp\left(\frac{-25.38}{\underline{T} - Ac_{1}}\right) \qquad \frac{1}{mm^{3}s}$$
[29]

Por otro lado, el crecimiento de los núcleos de austenita ocurre de la siguiente forma: los átomos de carbono son transportados mediante difusión a la intercara α/γ desde la intercara austenita-cementita a través de la austenita, dando como resultado una transformación de celdas α en celdas γ (Figura 15) (15).

Como Hillert (40) propuso para la transformación inversa en la expresión [9], si el crecimiento de la austenita es controlado por un mecanismo de difusión en volumen, la función f_G de la ecuación [25] se expresaría de la forma:

$$f_G \propto \frac{1}{\sigma_o} \tag{30}$$

Sin embargo, tal como se indicaba anteriormente en la ecuación [10], argumentando que la cinética de crecimiento de la austenita en la perlita podría estar controlada por un mecanismo de difusión en intercara, Roosz et al. (3) y también Hillert (41) para la transformación austenita-perlita propusieron una función de la forma:

$$f_G \propto \frac{1}{\sigma_o^2}$$
[31]

De esta forma, a partir de los resultados experimentales, Roosz et al. (3) proponen la siguiente ecuación empírica para expresar la velocidad de crecimiento como una función de la temperatura y de la morfología de la perlita:

$$G = \frac{7 \times 10^{-11}}{\sigma_o^2} \exp\left(\frac{-29.7}{T - Ac_1}\right) \qquad \frac{mm}{s}$$
[32]

El objetivo de este trabajo es calcular la fracción de volumen de austenita formada a una temperatura dada durante el calentamiento continuo. Para ello, se lleva a cabo el siguiente razonamiento matemático.

Partiendo de la ecuación de Avrami expresada en [22] y considerando una velocidad única y lineal de calentamiento v_c , la fracción de volumen de austenita formada en la perlita vendría dada por la ecuación

$$V_{\gamma} = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3}\dot{N}(T)G^{3}(T)t^{4}\right)$$
[33]

donde, como vimos en [23],

$$K(T) = \frac{\pi}{3} \dot{N}(T) G^3(T)$$

aplicando logaritmos y diferenciando en la expresión [33] se obtiene:

$$d\left(\ln\frac{1}{1-V_{\gamma}}\right) = \frac{dV_{\gamma}}{1-V_{\gamma}} = 4K(T)t^{3}dt$$
[34]

donde:

$$dt=dT/v_c$$
 y $t=\Delta T/v_c$

42

ł

ī.

sustituyendo el tiempo en la ecuación anterior

$$\frac{dV_{\gamma}}{1 - V_{\gamma}} = 4K(T)\frac{\Delta T^3}{v_c^4}dT$$
[35]

Si integramos el primer miembro de esta ecuación en el intervalo [0,x], y el segundo entre $[Ac_I,T]$,

$$\int_{0}^{x} \frac{dV_{\gamma}}{1 - V_{\gamma}} = \int_{Ac_{1}}^{T} 4K(T)\Delta T^{3} \frac{dT}{v_{c}^{4}} = \int_{Ac_{1}}^{T} \frac{4\pi}{3v_{c}^{4}} \dot{N}(T)G^{3}(T)\Delta T^{3}dT$$
[36]

$$-\ln(1-V_{\gamma}) = \int_{Ac_1}^T F(T)dT = INT \qquad \text{donde } F(T) = \frac{4\pi}{3v_c^4} N(T)G^3(T)\Delta T^3$$
[37]

luego,

$$V_{\gamma} = 1 - exp[-INT]$$
[38]

La integral *INT* ha sido calculada numéricamente mediante el método trapezoidal. Este método consiste en dividir el intervalo de integración $[Ac_1, T]$ en J subintervalos de longitud $\frac{Ac_1 - T}{J}$. De esta forma se obtienen J+1 puntos igualmente espaciados. Localizando los correspondientes puntos en la curva de la función a integrar, y conectando puntos consecutivos, mediante segmentos de línea se formarían J trapezoides. La suma de las áreas de dichos trapezoides sería aproximadamente el área bajo la curva de la función a integrar (44).

El punto crítico Ac_1 o temperatura de inicio de la transformación ha sido calculado a partir de la fórmula empírica de Andrews (45) la cual considera la influencia de la composición en la temperatura Ac_1 y se expresa como:

$$Ac_1 = 723 - 10.7 Mn - 16.9 Ni + 29.1 Si + 16.9 Cr + 290 As + 6.38 W$$
[39]

donde las composiciones vienen dadas en % en peso.

Por último, aplicando la ecuación [40a] calcularíamos la fracción de volumen de perlita residual, V_P , en la microestructura y teniendo en cuenta que la perlita está formada por un 88 % de ferrita y un 12 % de cementita (46), podemos calcular la fracción de volumen de todas las fases presentes en la microestructura a cualquier temperatura entre la temperatura ambiente y 1273 K, ecuaciones [40b] y [40c]:

 $V_P = 1 - V_{\gamma} \tag{40a}$

$$V\alpha = 0.88V_P$$
 [40b]

$$V_{\theta} = 0.12 V_P \tag{40c}$$

2.3 Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros Eutectoides. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en Función de la Temperatura

Si suponemos que una muestra dilata isotrópicamente, la variación de longitud de la muestra (ΔL) con respecto a su longitud inicial a temperatura ambiente (L_o) puede calcularse a partir de la variación de volumen (ΔV) con respecto al volumen inicial de la muestra a temperatura ambiente (V_o) como sigue:

$$\frac{\Delta V}{V_o} = \left(1 + \frac{\Delta L}{L_o}\right)^3 - 1$$
[41]

Como la variación relativa de longitud $\left(\frac{\Delta L}{L_o}\right)$ tiene un valor numérico muy pequeño, se desprecian los términos con potencias dos y tres y la expresión [41] se convierte en:

$$\frac{\Delta V}{V_o} = \left(1 + 3\frac{\Delta L}{L_o}\right) - 1$$
[42]

de tal forma que,

$$\frac{\Delta L}{L_o} = \frac{\Delta V}{3V_o} = \frac{V - V_o}{3V_o}$$
[43]

El volumen de la muestra a una temperatura dada puede ser calculado a partir del volumen de las celdas y de las fracciones de volumen de las fases presentes en la microestructura a dicha temperatura. Así, el volumen inicial de la muestra a temperatura ambiente vendría dado por la siguiente expresión, considerando que la fracción de ferrita y cementita en la perlita es 0.88 y 0.12, respectivamente (46):

$$V_o = 0.88 * 2 * a_{\alpha_o}^3 + 0.12 * \frac{1}{3} * a_{\theta_o} * b_{\theta_o} * c_{\theta_o}$$
[44]

donde a_{α_o} es el parámetro de red de la ferrita a temperatura ambiente y a_{θ_o} , b_{θ_o} y c_{θ_o} son los parámetros de red de la cementita. El parámetro de red de la ferrita a temperatura ambiente fue considerado el del hierro puro, aproximación suficientemente buena si se tiene en cuenta el bajo contenido en carbono de la celda (0.02 % en peso). En tal caso, $a_{\alpha_o} = 2.866$ Å (46). Los valores de los parámetros de red de la cementita a temperatura ambiente según Stuart y Ridley (47) son $a_{\theta_o} = 4.5246$ Å, $b_{\theta_o} = 5.0885$ Å y $c_{\theta_o} = 6.7423$ Å.

Por otro lado, el volumen de la probeta a una temperatura T entre 298 y 1273 K sería el siguiente:

$$V = V_{\alpha}(T) * 2 * a_{\alpha}^{3}(T) + V_{\theta}(T) * \frac{1}{3} * a_{\theta}(T) * b_{\theta}(T) * c_{\theta}(T) + V_{\gamma}(T) * a_{\gamma}^{3}(T)$$
[45]

donde $V_{\alpha,\theta,\gamma}$ son las fracciones de volumen de las fases ferrita, cementita y austenita, respectivamente a la temperatura *T*, a_{α} es el parámetro de red de la ferrita, a_{γ} es el parámetro de red de la austenita y a_{θ} , b_{θ} y c_{θ} son los parámetros de red de la cementita, todos ellos a una temperatura *T* entre 298 y 1273 K.

El valor 2 y 1/3 delante de los volúmenes de celda de la ferrita y cementita, respectivamente, pone de manifiesto la relación entre el numero de átomos de Fe en la celda unidad de la austenita y en las celdas de ferrita y cementita. Mientras que la celda de austenita es una celda cúbica centrada en las caras y contiene 4 átomos de Fe, la celda de ferrita es cúbica centrada en el cuerpo y contiene 2 átomos de Fe y la de la cementita es una celda ortorrómbica que contiene 12 átomos de Fe (48).

Los parámetros de red de las celdas a una temperatura T han sido calculados en función de los coeficientes de dilatación térmica lineal β_{α} , β_{γ} y β_{θ} de las mismas.

$a_{\alpha} = a_{\alpha_0} \left[1 + \beta_{\alpha} \left(T - 300 \right) \right]$	[46a]
$a_{\gamma} = a_{\gamma_0} \left[1 + \beta_{\gamma} \left(T - 300 \right) \right].$	[46b]
$a_{\theta} = a_{\theta_o} \left[1 + \beta_{\theta} \left(T - 300 \right) \right]$	[46c]
$b_{\theta} = b_{\theta_o} \left[1 + \beta_{\theta} \left(T - 300 \right) \right]$	[46d]
$c_{\theta} = c_{\theta_0} \left[1 + \beta_{\theta} \left(T - 300 \right) \right]$	[46e]

donde T es la temperatura en K y a_{γ_0} es el parámetro de red de la austenita a temperatura ambiente calculado como una función de la composición de acuerdo a los trabajos de Rydley et al. (49) y Dyson y Holmes (50),

$$a_{\gamma_o} = 3.573 + 0.033C + 0.00095Mn - 0.0002Ni + 0.0006Cr + 0.0031Mo + 0.0018V [47]$$

donde la composición química está dada en % en peso y a_{γ_o} en Å.

Los coeficiones de dilatación lineal de la ferrita y de la austenita considerados en los cálculos de este trabajo fueron medidos experimentalmente por Takahashi (42), quien encontró los siguientes valores: $\beta_{\alpha} = 1.244 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1} \text{ y } \beta_{\gamma} = 2.065 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$. Ambos coeficientes pueden considerarse independientes de la temperatura (47). En el caso de la cementita, el coeficiente de dilatación lineal aumenta con la temperatura (47). Usando datos publicados por Stuart y Ridley (47) se ha calculado una función que expresa la variación de dicho parámetro con la temperatura,

$$\beta_{\theta} = 6.0 \times 10^{-6} + 3.0 \times 10^{-9} (T - 273) + 1.0 \times 10^{-11} (T - 273)^2$$
[48]

donde T es la temperatura en K.

Por tanto, del conocimiento de la cinética de la transformacion $\alpha + \theta \rightarrow \gamma$ en el calentamiento continuo o cálculo de las funciones $V_{\alpha,\theta,\gamma}$ como una función de la temperatura (ecuaciones [38], [40b] y [40c]) y del conocimiento de los volúmenes de las celdas a una temperatura dada, podemos calcular el volumen de la muestra a una temperatura dada y, a partir de la ecuación [43], la variación relativa de longitud de la muestra en función de la temperatura o curva dilatométrica de calentamiento de la muestra.

A partir de todo este formulismo se ha desarrollado un programa informático en lenguaje Fortran 77 (Apéndice A) que permite obtener las variaciones relativas de longitud a cada temperatura entre 298 y 1273 K en un acero puramente perlítico.

Los datos input del programa son:

- 1. Composición del acero: C, Si, Mn, Ni, Mo, Cr, N, Al, Co, Cu, Nb, Ti, V, W en % en peso.
- 2. Morfología de la perlita inicial: $\sigma_o y a^P$.
- 3. Velocidad de calentamiento.

El programa proporciona los siguientes resultados o datos output:

- Fracción de ferrita, cementita y austenita presentes en la microestructura para toda temperatura entre 298 y 1273 K.
- Variación relativa de longitud de la muestra para toda temperatura entre 298 y 1273 K.

2.4 Procedimiento de Validación del Modelo de la Transformación Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo. Calentamiento Interrumpido mediante Temple

Para la validación experimental del modelo de cálculo de la cinética de formación de austenita en perlita en condiciones de calentamiento continuo, se han realizado ensayos interrumpidos de calentamiento mediante temple a diferentes temperaturas del intercrítico, o rango de temperaturas en el cual la transformación perlita-austenita tiene lugar.

Con el fin de estudiar la influencia de la morfología de la perlita inicial en la cinética de formación de austenita, se emplearon las tres morfologias de perlita obtenidas mediante tratamientos isotérmicos en el acero eutectoide Fe-0.76C-0.24Si-0.91Mn-0.013P en % en peso y caracterizadas en el capítulo anterior (Tabla I y II). Por otro lado, fueron seleccionadas tres velocidades de calentamiento, 0.05, 0.5 y 5 K/s, con el fin de estudiar el efecto de la velocidad en la cinética de transformación de la austenita bajo condiciones de calentamiento continuo.

Previamente, mediante dilatometría de alta resolución se determinaron las temperaturas de inicio y final de la transformación perlita-austenita en calentamiento continuo a las tres velocidades seleccionadas y partiendo de las tres microestructuras iniciales caracterizadas. Cada ensayo fue repetido tres veces y se calculó una curva dilatométrica, media aritmética de los tres ensayos. Sobre dichas curvas dilatométricas promedio se determinaron las temperaturas de inicio, Ac_1 , y las temperaturas finales,

 Ac_3 , de la transformación de austenización en los nueve casos planteados (tres morfologías de perlita como microestructuras iniciales y tres velocidades de calentamiento). Asimismo, estos ensayos dilatométricos permitieron validar experimentalmente el modelo de cálculo de las variaciones relativas de longitud como una función de la temperatura que ha sido propuesto en este trabajo.



Figura 18.- Ejemplo de respuesta dilatométrica de la transformación perlita-austenita.

Partiendo de una microestructura inicial completamente perlítica, el rango de temperaturas en el cual la transformación perlita-austenita tiene lugar queda limitado mediante la determinación de las temperaturas Ac_1 y Ac_3 . Las curvas de dilatación relativa, de las que se representa un ejemplo en la Figura 18, ponen de manifiesto la contracción que se experimenta en el material durante la formación de la austenita en el calentamiento. Esta anomalía de dilatación asociada a la propia transformación, convierte el análisis dilatométrico en uno de los métodos experimentales más fiables para el estudio de las transformaciones de fase.



Figura 19.- Curva dilatometrica y curva drivada.

Sobre curvas experimentales como la mostrada en la Figura 18 se seleccionaron siete temperaturas de interrupción, T_i , para los ensayos de calentamiento interrumpido: Ac_i 5 K, Ac_i , el máximo, el punto de inflexión, el mínimo de la curva, Ac_3 y Ac_3 +10 K. El punto de inflexión de la curva corresponde al mínimo de la curva derivada, la cual también es registrada por el dilatómetro (Figura 19).

Seleccionadas las temperaturas de interrupción, muestras de cada una de las microestructuras iniciales (MORF1-3) fueron calentadas a las diferentes velocidades de calentamiento (0.05, 0.5 y 5 K/s) desde la temperatura ambiente hasta cada una de las siete temperaturas de interrupción seleccionadas; una vez alcanzada la temperatura, la microestructura es congelada mediante temple de tal forma que la fracción de volumen de martensita formada durante el temple corresponderá a la fracción de volumen de austenita formada durante el calentamiento hasta la temperatura de interrupción.

Para calentamientos interrumpidos a temperaturas ligeramente inferiores a la temperatura de inicio de la transformación austenítica (Ac_I) , la microestructura final del ensayo de interrupción sería completamente perlítica como la microestructura inicial,

pues ninguna transformación ha tenido lugar antes de la temperatura de interrupción del calentamiento. Para temperaturas mayores que Ac_1 y menores que la temperatura final de la transformación (Ac_3), la microestructura resultante del temple de interrupción sería perlita-martensita, donde la martensita es la fase formada durante el temple a partir de la austenita presente antes de la temperatura de interrupción. Finalmente, para temperaturas de interrupción superiores a Ac_3 , la microestructura final del temple sería completamente martensitica. Del estudio de la variación de la fracción de volumen de austenita (martensita después del temple) como una función de la temperatura de interrupción podremos conocer la cinética de formación de la austenita en una microestructura inicial completamente perlítica en condiciones anisotérmicas.

Las microestructuras resultantes del calentamiento interrumpido por temple fueron desbastadas y pulidas como se describió en el capítulo anterior. El ataque químico de la microestructura se realizó mediante el reactivo LePera, mezcla 1:1 en volumen de 1% metabisulfato sódico disuelto en agua destilada y picral 4 % (51). Dicho ataque revela la perlita negra y la martensita blanca permitiendo así distinguir perfectamente pequeñas fracciones de martensita en la microestructura es decir, las pequeñas fracciones de volumen de la austenita formada durante el calentamiento antes de ser interrumpido por temple. La Figura 20 muestra un ejemplo de una secuencia de formación de austenita durante el calentamiento continuo de la morfología MORF1 a una velocidad de calentamiento de 0.05 K/s. La microestructura de la Figura 20(a) está formada por perlita y por unos pocos granos de martensita que corresponden a la austenita formada durante el calentamiento antes del máximo de la curva dilatométrica de calentamiento. Para una temperatura cinco grados mayor (Figura 20(b)), la fracción de volumen de martensita aumenta y, a la temperatura del mínimo, la fase austenita (martensita en la microestructura de temple) es mayoritaria (Figura 20(c)). Para la temperatura Ac_3 , la transformación ha terminado prácticamente y sólo algunas perlitas quedan por disolver (Figura 20(d)).

La fracción de volumen de austenita formada a cada temperatura de interrupción (martensita en las microestructuras reveladas metalográficamente) fue cuantificada a

partir de 10 micrografías ópticas como las mostradas en la Figura 20 de acuerdo con el método de conteo por puntos de Underwood (36) descrito en el capítulo anterior.



(a) $T_I = M$ áximo (1004 K)





(c) $T_I = M$ ínimo (1014 K)

(d) $T_I = Ac_3 (1017 \text{ K})$

Figura 20.- Ejemplo de las microestructuras obtenidas en los calentamientos interrumpidos mediante temple. Muestra MORF1, velocidad de calentamiento 0.05 K/s

2.5 Resultados de Validación del Modelo de la Transformación Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo.

La validación experimental del cálculo propuesto para la cinética de formación de austenita en perlita y de la variación de longitud como una función de la temperatura en condiciones de calentamiento continuo, ha sido realizada en el acero eutectoide de composición Fe-0.76C-0.24Si-0.91Mn-0.013P en % en peso. La consideración teórica de la influencia de la morfología de la perlíta sobre la cinética de la transformación perlita-austenita ha sido validada mediante el ensayo de tres morfologías iniciales diferentes de perlita. La parámetros morfológicos input del programa fueron medidos como fue descrito en el capítulo anterior y sus valores se indican en la Tabla VI.

Muestra de Perlita	Temperatura de Formación, K	Técnica de Caracterización	<i>σ</i> ₀, μ m	<i>a^P</i> , μ m
MORF3	798	MET ,	0.06±0.01	1.65±0.07
MORF2	923	MEB	0.08±0.01	1.76±0.34
MORF1	948	MEB	0.20±0.03	4.16±0.70

Tabla VL- Caracterización morfógica de la perlita.

Por otro lado, la influencia de la velocidad de calentamiento ha sido validada mediante el ensayo de cada una de las morfologías seleccionadas a tres velocidades diferentes de calentamiento 0.05, 0.5 y 5 K/s.

La Figura 21 muestra los resultados de la validación para el cálculo de la cinética de formación de austenita para las tres morfologías y las tres velocidades de calentamiento consideradas.



Figura 21.- Resultados experimentales y calculados para la formación de austenita en perlita de un acero eutectoide.

Como se esperaba, los datos experimentales demuestran que la transformación perlita→austenita es una transformación rápida; en la mayoría de los casos la transformación es concluida en un intervalo de 20 o 30 K. Como ya se ha mencionado, ello es debido a la corta distancia efectiva de difusión del proceso. Sin embargo, para la perlita con espaciados interlaminares y longitud de colonia de perlita mayores, la velocidad de nucleación y crecimiento tiende a disminuir y la cinética de formación de la austenita es más lenta.

Por otro lado, para una morfología de perlita dada, la cinética de formación es considerablemente más lenta para velocidades de calentamiento más altas. Las diferencias en la cinética de formación debidas a las condiciones de calentamiento se acentúan cuando la perlita presenta una morfología más grosera.

Estas tendencias experimentales son seguidas por los valores calculados por el modelo cinético; sin embargo, en general, la cinética de formación calculada es mucho más rápida que la obtenida experimentalmente. Por tanto, de estos resultados se concluye que este modelo de cálculo, basado principalmente en el trabajo de Roosz et al. (3), requiere ciertas modificaciones.

Lo primero que podemos preguntarnos es por qué las cinéticas de nucleación y crecimiento propuestas por Roosz et al. no reproducen nuestros datos experimentales. De la comparación de las morfologías de perlita usadas por Roosz y las nuestras (Tablas VI y VII) podemos concluir que al asumir un valor de i=2 en la ecuación [27], estamos sobreestimando la cinética de nucleación en nuestro estudio. Las longitudes de borde de colonia de perlita consideradas en su estudio son un orden de magnitud mayores a las nuestras, eso implica que el número de esquinas de colonia de perlita para la nucleación es dos órdenes de magnitud menor en su caso que en el nuestro. Por lo cual, podríamos pensar que el valor de i inicialmente considerado había sido sobrevalorado.

En efecto, en este estudio se ha podido observar una fuerte y compleja dependencia del exponente i con el espaciado interlaminar y con la longitud de borde de colonia, lo

cual parece demostrar que la dependencia morfológica sugerida por Roosz et al. (3) para la velocidad de nucleación estaba excesivamente restringida y/o simplificada. De acuerdo con esto, supondremos que:

$$f_N = K_N N_C^{f(a^p,\sigma_o)} \text{ para } v_c \text{ constante}$$
[49]

Morfología de Perlita	<i>σ₀</i> , μ m	<i>a^P</i> , μm
A	0.12	13.4
В	0.06	13.8
С	0.11	9.80
D	0.14	7.40

Tabla VII.- Morfología de la perlita. Roosz et al. data (3)

Por otro lado, recordemos que se ha comprobado experimentalmente cómo la cinética de nucleación y crecimiento se ven afectadas, al incrementar la velocidad de calentamiento. Parece entonces razonable pensar que, a una temperatura dada, el número de núcleos de austenita que se forman no es el mismo si dicha temperatura ha sido alcanzada a una velocidad de quasi-equilibrio (0.05 K/s) (52) o a una velocidad mucho mayor (5 K/s). Por tanto podemos suponer que:

$$f_N = K_N N_C^{f(\mathbf{v}_c)} \text{ para } a^P \text{ y } \sigma_o \text{ constantes}$$
[50]

Con este planteamiento y tras estudiar la dependencia del exponente *i* con los parámetros morfológicos de la perlita σ_o y a^p , se propone una función f_N para el cálculo de la velocidad de nucleación de la forma,

$$f_N = 1 \times 10^{-11} N_C^{0.3514\nu_c - 0.1334\ln N_c + 4.1414}$$
[51]



Figura 22.- Resultados experimentales y calculados para la formación de austenita en perlita de un acero eutectoide tras las modificaciones realizadas en la cinética de nucleación.

donde N_C viene dado por la ecuación [26].

La Figura 22 muestra los resultados experimentales y los calculados tras las modificaciones realizadas en la cinética de nucleación del modelo original. De esta figura podemos concluir que para velocidades de calentamiento altas, la cinética de crecimiento de la austenita es controlada por un mecanismo distinto y más lento que a velocidades de calentamiento lentas, pues los resultados calculados siguen siendo más rápidos que los experimentales para la velocidad de calentamiento de 5 K/s.

Hasta aquí, de acuerdo con Roosz et al. (3) y con Hillert (41), se ha supuesto que el crecimiento era controlado por la difusión de los elementos aleantes sustitucionales a lo largo de la intercara perlita-austenita. Si por el contrario consideraramos ahora que el crecimiento es controlado por un mecanismo de difusión en volumen, tal como se señalaba en la ecuación [30], la función f_G sería inversamente proporcional al espaciado interlaminar según la expresión (40):

$$f_G = \frac{1 \times 10^{-10}}{-\sigma_o}$$
[52]

Según describió Hillert (40,41) para el caso de la formación isotérmica de perlita a partir de la austenita, ambos mecanismos de difusión, en volumen y en intercara, tienen lugar al mismo tiempo durante el proceso de crecimiento, aunque uno dominaría sobre el otro dependiendo de la temperatura.

Porter (53) explica perfectamente la diferencia entre difusión en frontera de grano y difusión en volumen en relación con su aplicación a las transformaciones de fases, así como la transición entre ambos mecanismos. Si la frontera de grano presenta un espesor δ y el tamaño de grano de la austenita es *d*, el flujo total de átomos de carbono vendría dado por la siguiente fórmula:

$$J = \frac{J_b \delta + J_v d}{d} = -\left(\frac{D_b \delta + D_v d}{d}\right) \frac{dC}{dx} = -D_{ap} \frac{dC}{dx}$$
[53]

donde J_b es el flujo de soluto a lo largo de la intercara, J_v es el flujo de soluto a través de un grano de austenita, D_b y D_v son los coeficientes de difusividad de intercara y de volumen, respectivamente, y D_{ap} , coeficiente de difusividad aparente se expresa como:

$$D_{ap} = D_v + D_b \frac{\delta}{d}$$
^[54]

La Figura 23 muestra el efecto de la temperatura en los coeficientes de difusividad de intercara y de volumen. Aunque $D_b > D_v$ a cualquier temperatura, su diferencia aumenta cuando la temperatura disminuye. Sin embargo, cuando D_b es multiplicado por el factor δ/d , la contribución de la difusión en intercara a la difusión total es despreciable en comparación con la contribución de la difusión en volumen a altas temperaturas, pero, por el contrario, la difusión en intercara domina a bajas temperaturas.



Figura 23.- Influencia de la temperatura en los coeficientes de difusividad de volumen y de intercará.

En el caso que nos ocupa en este trabajo, la temperatura no es constante, sino que la transformación tiene lugar durante el calentamiento continuo. De cualquier forma, parece lógico pensar que a velocidades altas de calentamiento la tranformación tiene lugar mayoritariamente a temperaturas más altas que para el caso de calentamientos

lentos, de ahí que la consideración de un mecanismo de difusión en volumen en lugar de intercara parezca más razonable en el cálculo de la velocidad de crecimiento de austenita a la velocidad más alta de calentamiento.

Por otra parte, en el cálculo de la velocidad de crecimiento de la austenita para velocidades altas de calentamiento se ha considerado en un principio la misma energía de activación que para el resto de los casos. Dicha energía de activación fue calculada empíricamente por Roosz et al (3). La exponencial de la ecuación [32] representa la influencia de la temperatura en la velocidad de crecimiento, es decir, considera la variación de las concentraciones de equilibrio y el coeficiente de difusividad de intercara con la temperatura. Debido a su carácter empírico y a los múltiples factores de los que depende, es difícil evaluar la variación que supondría para la energía de activación y para el crecimiento el considerar un control de difusión en volumen o un control de difusión en intercara.

En el caso de átomos sustitucionales, la energía de activación para la difusión en volumen es aproximadamente el doble de la energía requerida para la difusión en intercara (53). Sin embargo, el carbono es un elemento intersticial en la aleación Fe-C y su difusión en la red austenítica se produce a través de lugares intersticiales, lo que hace que la energía de activación para la difusión de este elemento en volumen y en intercara sean similares. Por tanto, en este trabajo se considera que la energía necesaria para la activación de un crecimiento controlado por la difusión de carbono en volumen es similar, o del orden, a la energía necesaria para la activación de un crecimiento sustitucionales en intercara.

Por otro lado, Hillert (40,41) señaló, para el caso de la transformación inversa, que la mayor diferencia entre ambos mecanismos estribaba principalmente en la propia influencia del espaciado interlaminar de la perlita sobre la velocidad de crecimiento. Así, parece razonable considerar que dicha energía de activación es simplemente la energía necesaria para que un núcleo de austenita inicie su crecimiento y el mecanismo dominante que controle el crecimiento afectará principalmente a la velocidad con que crezca a través de la morfología de la perlita inicial.

La Figura 24 muestra nuevamente los resultados experimentales junto a los calculados para la cinética de formación de austenita tras las modificaciones realizadas en el modelo, en relación con las velocidades de nucleación y de crecimiento empleadas. La gráfica refleja un buen acuerdo entre las predicciones del modelo y los resultados experimentales.

Las Figuras 25.a-c muestran las curvas experimentales, promedio de tres ensayos, así como las curvas calculadas entre 770 y 1270 K obtenidas durante el calentamiento del acero eutectoide estudiado, a velocidades de 0.05, 0.5 y 5 K/s, partiendo de las tres microestructuras iniciales, MORF1-3, de morfología diferente. Evidentemente, en este modelo de cálculo dilatométrico se ha tenido en cuenta el modelo definitivo de cinética desarrollado en este trabajo para el cálculo de las fracciones de volumen V_{α} , V_{θ} y V_{γ} a las diferentes temperaturas de calentamiento.

Las curvas pueden dividirse en tres zonas características: a) desde la temperatura ambiente hasta la temperatura Ac_1 a la cual la perlita comienza a disolverse, b) desde Ac_1 hasta la temperatura Ac_3 a la cual la transformación ferrita+cementita→austenita termina, y c) desde Ac_3 hasta la temperatura máxima del calentamiento continuo.

En la primera zona todas las muestras presentan una expansión térmica lineal con la temperatura. Las fases presentes en dicho tramo son las fases que constituyen la microestructura inicial, ferrita y cementita, las cuales permanecen invariables hasta la temperatura Ac_i ; luego, la curva dilatométrica registra en este primer tramo la expansión térmica de ambas fases durante el calentamiento. Alcanzada la temperatura Ac_i , la variación relativa de longitud de la muestra con la temperatura deja de ser lineal. La transformación eutectoide empieza y la variación de longitud dependerá de la competición entre la expansión térmica y la contracción debida a la transformación eutectoide, que como ya mencionamos no es más que la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ controlada e inducida por la disolución de la cementita. La diferencia en el volumen atómico de ambas fases hace que dicha transformación sea responsable de la contracción que tiene lugar durante el calentamiento de la muestra. Por último, terminada la transformación, la muestra es ya completamente austenítica y su expansión



Figura 24.- Resultados experimentales y calculados para la formación de austenita en perlita de un acero eutectoide tras las modificaciones realizadas en las velocidades de nucleación y crecimiento empleadas en el modelo.


Figura 25.a.- Resultados experimentales y calculados de las curvas de dilatación de un acero eutectoide con morfología MORF1.



Figura 25.b.- Resultados experimentales y calculados de las curvas de dilatación de un acero eutectoide con morfología MORF2.



Figura 25.c.- Resultados experimentales y calculados de las curvas de dilatación de un acero eutectoide con morfología MORF3.

es lineal con la temperatura. En base a esto, resulta evidente que para el estudio de las transformaciones por análisis dilatométrico, lo realmente importante es conocer la variación del parámetro $\frac{\Delta L}{L_o}$ en función de la temperatura y no tanto el valor de dicho parámetro. A pesar de ello y tal como se discute a continuación, el modelo de cálculo dilatométrico de la Figura 25.a-c no sólo reproduce con una buena precisión la forma y las temperaturas de transformación de la curva experimental, sino que también reproduce bastante bien los propios valores experimentales de la variación relativa de longitud.

En este sentido, las diferencias entre las variaciones relativas de longitud experimentales y las calculadas pueden ser atribuidas a errores de la calibración automática del dilatómetro, y/u otros errores sistemáticos no controlables en la ejecución de los ensayos, debido a la irrelevancia de sus efectos sobre el objetivo del análisis dilatométrico. De hecho, curvas dilatométricas experimentales correspondientes a ensayos repetidos muestran diferentes valores de variación relativa de longitud, pero siempre las mismas temperaturas críticas de transformación y, por supuesto, las mismas diferencias en contracción neta entre el inicio y final de la transformación, parámetros éstos que caracterizan realmente a una transformación y que indican la fiabilidad del análisis dilatométrico con vistas a su estudio.

Los coeficientes de dilatación lineal experimentales de la microestructura inicial y de la austenita vendrían dados por las pendientes de las curvas dilatométricas en el primer y tercer tramo, respectivamente. En general, podemos concluir que la dilatación de la austenita propuesta en el cálculo está de acuerdo con los resultados experimentales. En el caso de la dilatación de la perlita las predicciones no son tan exactas. Ello puede ser debido a que en el modelo de dilatación se considera que la microestructura inicial está formada por dos fases, un 88% de ferrita y un 12% de cementita, las cuales dilatan como fases individuales mientras que experimentalmente la perlita presenta un coeficiente de dilatación propio y dilata como un único microconstituyente.

Por último, las temperaturas críticas de transformación Ac_1 y Ac_3 , así como las magnitudes experimentales de las contraciones netas debidas a la transformación eutectoide, son reproducidas por las curvas dilatométricas calculadas con una gran exactitud.

2.6 Conclusiones

- En este trabajo se ha realizado un modelo matemático para el cálculo de la cinética de formación de austenita a partir de perlita en un acero eutectoide en condiciones de calentamiento continuo. En el modelo propuesto, la ecuación de Avrami ha sido aplicada con éxito en el cálculo de la fracción de volumen de austenita formada en condiciones no isotérmicas.
- 2. El modelo considera la influencia de la morfología inicial de la perlita y de la velocidad de calentamiento en la cinética de nucleación y crecimiento de la fase austenita. Inicialmente la influencia de la morfología en la transformación fue calculada de acuerdo con el modelo propuesto por Roosz et al. Sin embargo, del estudio de validación del modelo en un amplio rango de espaciados interlaminares de perlita y velocidades de calentamiento se ha podido encontrar una función morfológica más completa que la propuesta por Roosz para el cálculo de la velocidad de nucleación.
- 3. Por otro lado, se ha podido comprobar cómo el mecanismo que controla la cinética de crecimiento varía dependiendo de la velocidad de calentamiento. De tal forma que, para velocidades superiores a 0.5 K/s, el mecanismo que regula el crecimiento de la austenita es la difusión en volumen de carbono en la austenita, en lugar de la difusión de los elementos aleantes sustitucionales a lo largo de la intercara perlitaaustenita.
- 4. Se ha realizado un modelo para calcular la variación relativa de longitud de una muestra de acero perlítico en calentamiento continuo; es decir, un modelo de cálculo del comportamiento dilatométrico del proceso de austenización de un acero

eutectoide. Para el cálculo se requiere el conocimiento de la evolución del volumen de las celdas y las fracciones de volumen de las fases presentes a lo largo del proceso de calentamiento.

5. De la validación experimental del modelo para tres morfologías diferentes de la perlita inicial y tres velocidades de calentamiento se concluye que el modelo reproduce con gran exactitud tanto las temperaturas críticas Ac₁ y Ac₃ de las curvas dilatométricas como las contracciones netas durante la transformación perlita→austenita. El coeficiente de dilatación de la austenita obtenido en el modelo de cálculo puede considerarse acertado. Sin embargo el coeficiente experimental de dilatación lineal de la perlita pone de manifiesto que dicha microestructura posiblemente dilata como un todo y, considerar que lo hace como una microestructura constituida por dos fases con coeficientes de dilatación propios, sólo proporciona resultados aproximados en el modelo de cálculo.

Capítulo 3

Austenización de Aceros Ferríticos

3.1 Consideraciones Generales

La extremadamente baja templabilidad de los aceros ferríticos hace imposible poder congelar en forma de martensita a temperatura ambiente la austenita formada a alta temperatura. Este hecho es con seguridad la causa del bajo número de estudios de la austenización de aceros con microestructura inicial completamente ferrítica, es decir, de aceros con muy bajo contenido de carbono.

Speich et al. (1) estudiaron la formación de austeníta en un acero bajo en carbono mediante calentamiento por laser pulsado y temple por pulverizado de He y agua. Con esta técnica se puede alcanzar una velocidad de temple de 10^5 K/s. Estos autores encontraron que la transformación ferrita-austenita en hierro y en una aleación Fe-0.013 %C en peso se completa alrededor de 1223 K a una velocidad de calentamiento de 10^6 K/s. La baja fuerza motriz de la transformación (6 cal/mol) y la ausencia de defectos en la estructura sugiere que la transformación ferrita-austenita ocurre por un mecanismo masivo de transformación. Estos investigadores comprobaron también que la nucleación inicial de la austenita tiene lugar en las fronteras de grano α/α para ambos aceros y que la formación de una intercara α/γ de baja energía en el borde de grano ferrítico no supone una barrera energética para la nucleación. Asimismo, estimaron una velocidad de crecimiento de la intercara α/γ a 1223 K de 1.6 cm/s en ambos aceros asumiendo, como ya se dijo, que no existe una barrera energética para la nucleación.

Si la ferrita inicial presenta una morfología acicular (ferrita bainítica o ferrita acicular), la nucleación de la austenita ocurre inicialmente en el borde de grano austenítico primigenio (54). Yang y Bhadeshia (55) estudiaron la cinética de austenización de una mezcla de ferrita bainítica o acicular y austenita residual (austenita que permanece sin transformar tras la formación isotérmica de la ferrita bainítica) y encontraron que, debido a que la transformación austenita-ferrita bainítica cesa antes de que la austenita adquiera su composición de equilibrio (fenómeno de reacción incompleta), la transformación inversa, ferrita bainítica-austenita, no puede ocurrir hasta que la muestra es calentada a una temperatura para la cual la austenita residual alcance el campo monofásico γ . Así, cuanto menos carbono presenta la austenita residual, mayor temperatura se requiere para la austenización.

En este capítulo se estudian los mecanismos de nucleación y crecimiento que controlan la transformación ferrita-austenita, así como la influencia de los elementos aleantes en la temperatura de inicio de la transformación. Como en el capítulo anterior, se propone un modelo que calcula la fracción de volumen de austenita formada, pero en este caso, a partir de una microestructura completamente ferrítica y en condiciones de calentamiento continuo y quasi-equilibrio. Conocida la cinética completa de la transformación y mediante el cálculo de los volúmenes de las celdas presentes a cada temperatura, se han podido modelizar las curvas dilatométricas de calentamiento continuo y tres aceros con 0.01% C y aleados con Mn (0.25-0.50 % en peso).

3.2 Modelización de la Transformación Ferrita-Austenita en el Calentamiento Continuo

La modelización de la transformación ferrita-austenita tiene en sí misma un gran interés para profundizar en el conocimiento del proceso de austenización de los aceros. Además, como se vió en el capítulo anterior en relación con la transformación perlita-austenita, el conocimiento previo de las fracciones de volumen que se transforman a cada temperatura es imprescindible para modelizar el comportamiento dilatométrico de una muestra de acero ferrítico durante su austenización por calentamiento continuo. En la austenización de una microestructura completamente ferrítica, la única transformación que tiene lugar durante el calentamiento es la transformación de la ferrita, o celdas α , en austenita, o celdas γ . Para poder calcular la fracción de volumen de austenita formada en función de la temperatura durante el proceso de calentamiento continuo de la ferrita, es necesario conocer previamente el comportamiento de dicha transformación en condiciones isotérmicas es decir, conocer la ecuación que representa la variación de la fracción de volumen de austenita a transformación de la fracción de volumen de austenita en función del tiempo a una temperatura dada. Posteriormente, como se hizo para la transformación perlita-austenita, a través de la integración de dicha relación con la temperatura se podrá conocer la evolución de la transformación para el calentamiento continuo.

Por otra parte, también de la misma forma que en la transformación perlita-austenita, la transformación ferrita-austenita es controlada por mecanismos de nucleación y crecimiento. Sin embargo, el hecho de que la ferrita presente una baja cantidad de carbono en solución sólida hace que existan importantes diferencias entre ambas transformaciones y los mecanismos por los que éstos se llevan a cabo.

La transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ en el hierro puro tiene lugar por mecanismos de transformación masivos, esto hace que la nucleación y el crecimiento de la austenita en ferrita sean procesos muy rápidos (1). La transformación llega a ser tan rápida que la temperatura crítica de transformación es prácticamente independiente de la velocidad de calentamiento, cuando ésta es inferior a 15000 K/s.

Los posibles lugares de nucleación de la austenita en la ferrita son ilustrados esquemáticamente en la Figura 26. Estos lugares son: la matríz ferrítica, las caras de fronteras de grano, los bordes de fronteras de grano y/o las esquinas de fronteras de grano. Los tres primeros lugares se representan en la Figura 26 como 1, 2 y 3 respectivamente; desafortunadamente, las esquinas de frontera de grano no son tan fáciles de mostrar en un diagrama de dos dimensiones.



Figura 26.- Posibles lugares de nucleación para la austenita en ferrita.

Según las investigaciones de Speich et al. (1), no fue detectado experimentalmente ningún caso de nucleación homogénea (posición 1 de la Figura 26) y, del examen en dos dimensiones, no pudieron sacarse conclusiones de la nucleación en esquinas de fronteras de grano. Sin embargo, pudo comprobarse cómo la nucleación en bordes de fronteras de grano era más favorable que en las caras de fronteras de grano ferrítico; el por qué no estaba claro. De todos estos datos se concluye que para el cálculo de la velocidad de nucleación, caras, bordes y esquinas de fronteras de grano deben ser tenidos en cuenta.

Cuando la velocidad de nucleación de una transformación es muy alta, los posibles lugares de nucleación son ocupados rápidamente. En tal caso, la reacción completa de transformación es controlada principalmente por la cinética de crecimiento. Este comportamiento se denomina 'mecanismo de saturación' (56). Según el criterio de Cahn (56), este mecanismo tiene lugar cuando aparece al menos un núcleo por grano en un tiempo mucho menor que D/G, siendo D el diámetro medio de grano y G la velocidad de crecimiento. A partir de datos experimentales de Dirnfeld et al (27), encontramos que para un diámetro de grano ferrítico de 14 µm, el tiempo necesario para que aparezca un núcleo por grano es 1/40 (D/G) a cada temperatura de transformación. De este cálculo aproximado podemos concluir que considerar la saturación de los lugares de nucleación en el estudio de la cinética de formación de austenita en ferrita es una buena aproximación. Por lo tanto, la energía necesaria para nuclear austenita en ferrita es despreciable para el hierro puro y la transformación estará controlada únicamente por la

velocidad de la intercara. El tiempo necesario para completar la transformación a 1223 K fue medido por Speich et al (1) resultando de 6 ms. Para un diámetro de grano de 200 μ m, dicho resultado supone una velocidad máxima de intercara de 1.6 cm/s. Esta es una velocidad muy alta, pero aún así es mucho menor que la velocidad de la transformación martensítica, 10⁵ cm/s (57).

Por otra parte, el único tratamiento teórico referido en la literatura que podría describir la migración de la intercaras α/γ considerando la ausencia de difusión de elementos aleantes, es el modelo teórico descrito por Christian (43) y denominado crecimiento controlado por procesos en la intercara. Este tipo de mecanismo describe el crecimiento de una fase cuando el movimiento de una intercara no da lugar ni a deformación, ni a un cambio de composición, sino sólo a un cambio de fase. Así, el avance de la intercara α/γ tiene lugar por el salto de átomos a través de ella, y ningún proceso de difusión tiene lugar al no haber prácticamente ningún elemento en solución sólida en la red del hierro.

En tal caso, la velocidad de crecimiento de la austenita en la ferrita a una temperatura dada se calcula a partir de la expresión dada por Christian (43):

$$G = \frac{\delta v}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G_{act}}{kT}\right) \Delta g^{\alpha \to \gamma}(T) = \frac{\delta v}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right) \Delta g^{\alpha \to \gamma}(T) \quad [55]$$

donde δ es el espesor de intercara, ν es el número de intentos de salto de la barrera de energía de activación para el crecimiento por unidad de tiempo, k es la constante de Boltzman, T es la temperatura absoluta, ΔG_{act} es la energía de activación para el crecimiento, ΔS es la entropía de activación por átomo, ΔH es la entalpía de activación por átomo, y $\Delta g^{\alpha \rightarrow \gamma}$ es la diferencia de energía libre de Gibbs por átomo entre las fases α y γ de idéntica composición o comúnmente conocida como fuerza motriz de la transformación (58,59). La Figura 27 esquematiza el significado físico de estas variables y muestra cómo para que tenga lugar la transformación se necesita sobrepasar una barrera energética. La temperatura a la cual se inicia la transformación es aquélla para la cual la diferencia de energía libre de Gibbs de las fases empieza a ser negativa, como se muestra en la figura, y la energía libre de la fase γ es menor que la de la fase α .



Figura 27.- Esquema de la variación de energía libre para la transferencia de átomos a través de la intercara α/γ .

Los valores de ΔH y ν son desconocidos; sin embargo, se suponen generalmente iguales a la entalpía de activación para la difusión de frontera de grano (60) (ΔH =276.33×10⁻²¹ J por átomo) y a *kT/h*, respectivamente. Por otra parte, Christian (43) sugiere que ν en muchos casos no es igual a la frecuencia térmica del átomo y que debe ser evaluado a partir de los datos experimentales. El valor de la entropía tampoco es un valor conocido. Puede ser positivo o negativo, pero usando los resultados experimentales obtenidos por Speich et al. (1) para la velocidad de crecimiento de la austenita podemos obtener el valor de $\nu \exp(\Delta S/k)$. Como ya se mencionaba, la velocidad de crecimiento de la austenita en ferrita con un tamaño de grano de 200 µm a 1223 K es de 1.6 cm/s. Si se considera la entalpía de activación igual a la entalpía para la difusión a través de una frontera de grano, un espesor de intercara aproximado de 5 Å y un $\Delta g^{\alpha \rightarrow \gamma}$ de 41.87×10⁻²⁴ J por átomo a 1223 K, podemos obtener un valor para $\nu exp\left(\frac{\Delta S}{K}\right) = 1.65 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$. Así, la velocidad de crecimiento de la austenita en ferrita en función de la temperatura se expresará de acuerdo con la siguiente fórmula:

. . .

• • •

· · · · · · donde $\Delta g_{Fe_{Mag}}^{\alpha \to \gamma}$ y $\Delta g_{Fe_{NM}}^{\alpha \to \gamma}$ son las componentes magnética y no magnética, respectivamente, de la variación de energía libre de Gibbs para la transformación en el hierro puro. A diferencia de la componente magnética, la no magnética varía linealmente con la temperatura y la primera es aproximadamente cero a temperaturas menores de 620 K. Ambas funciones se describen en la Tabla VIII y se representan en la Figura 28.



Figura 28.- Factorización de la variación de la energía libre de ferrita y austenita en el hierro puro.

Esta figura representa la variación de las dos componentes de la energía libre de Gibbs en función de la temperatura para el hierro puro de acuerdo a los resultados experimentales reunidos por Zener (62).

Para considerar la influencia de los elementos sustitucionales sobre dicha variación, se define ΔT_{Mag} y ΔT_{NM} como la modificación en la temperatura debido al efecto de la concentración de los elementos aleantes sustitucionales. Así $\Delta g^{\alpha \rightarrow \gamma}$ para un sistema Fe-X se calcularía a partir de las componentes magnética y no magnética de la energía libre del hierro, teniendo en cuenta la citada modificación en temperatura debido al efecto de los elementos aleantes sustitucionales:

$$\Delta g^{\alpha \to \gamma} \{T\} = \Delta g_{Fe_{NM}}^{\alpha \to \gamma} \{T - x \Delta T_{NM}\} + \Delta g_{Fe_{Mag}}^{\alpha \to \gamma} \{T - x \Delta T_{Mag}\}$$
^[58]

siendo x la fracción molar de elemento sustitucional en % atómico.

 ΔT_{Mag} y ΔT_{NM} fueron determinados por Aaronson et al. (58,59) y se recogen en la Tabla IX.

Conocidos los mecanismos que regulan la nucleación y el crecimiento de la transformación, podemos calcular la relación entre la fracción de volumen de austenita formada y el tiempo de transformación transcurrido a una temperatura T.

Elemento Aleante	ΔT_{Mag}	ΔT_{NM}
	K por % atómico	K por % atómico
Si	-3	0
Mn	-37.5	-39.5
Ni	-6	-18
Мо	-26	-17
Cr	-19	-18
V	-44	-32
Со	19.5	16
Al	8	15
Cu	4.5	-11.5

Tabla IX.- Valores de ΔT_{Mag} y ΔT_{NM} para diferentes elementos sustitucionales.

Si consideramos que durante el proceso de nucleación tiene lugar la saturación de los distintos lugares de nucleación, y que la velocidad de crecimiento G de los núcleos es constante a una temperatura dada, el volumen que ocupa la austenita formada en un tiempo t sería (27,56):

ī.

$$V_{\gamma e} = 2GtS + \pi G^2 t^2 L + \frac{4}{3}\pi G^3 t^3 C$$
[59]

donde S es la superficie de frontera de grano, L es la longitud de frontera de grano y C es el número de esquinas de frontera de grano.

El diferencial de volumen formado en un tiempo dt,

$$dV_{\gamma e} = \left(2GS + 2\pi G^2 Lt + 4\pi G^3 Ct^2\right)dt$$
[60]

Si tenemos en cuenta el pinzamiento entre núcleos de austenita creciendo, el verdadero volumen de austenita formado en un tiempo *dt* sería el anterior, pero modificado por la fracción de ferrita residual:

$$dV_{\gamma} = \left(1 - \frac{V_{\gamma}}{V}\right) dV_{\gamma e}$$
[61]

siendo V_{γ} y V el volumen de austenita formada y volumen total de la muestra, respectivamente. Integrando en la ecuación anterior:

$$\int_{0}^{V_{\gamma}} \frac{dV_{\gamma}}{1 - \frac{V_{\gamma}}{V}} = \int_{0}^{V_{\pi}} dV_{\gamma e} = \int_{0}^{t} \left(2GS + 2\pi G^{2}Lt + 4\pi G^{3}Ct^{2} \right) dt$$
[62]

$$-V\ln\left(1 - \frac{V_{\gamma}}{V}\right) = \left(2GSt + \pi G^{2}Lt^{2} + \frac{4}{3}\pi G^{3}Ct^{3}\right)$$
[63]

se obtiene que:

$$-\ln(1-V_{\gamma}) = 2G\frac{S}{V}t + \pi G^{2}\frac{L}{V}t^{2} + \frac{4}{3}\pi G^{3}\frac{C}{V}t^{3}$$
[64]

siendo V_{γ} la fracción de volumen de austenita formada en el tiempo t. Así:

$$V_{\gamma} = 1 - exp\left[-\left(K_{s}t + K_{e}t^{2} + K_{c}t^{3}\right)\right]$$
[65]

donde:

$$K_s = 2G\frac{S}{V}$$
 $K_e = \pi G^2 \frac{L}{V}$ $K_c = \frac{4}{3}\pi G^3 \frac{C}{V}$ [66]

Si expresamos la superficie de borde de grano por unidad de volumen (S/V), la longitud de borde de grano por unidad de volumen (L/V), y el número de esquinas de borde de grano por unidad de volumen (C/V) en términos del diámetro medio de grano ferrítico D (27),

$$\frac{S}{V} = \frac{3.35}{D} \qquad \frac{L}{V} = \frac{8.5}{D^2} \qquad \frac{C}{V} = \frac{12}{D^3}$$
[67]

entonces:

$$K_{s} = \frac{6.7G}{D} \qquad K_{e} = \frac{26.7G^{2}}{D^{2}} \qquad K_{c} = \frac{50.3G^{3}}{D^{3}}$$
[68]

donde la velocidad de crecimiento G se calcula de acuerdo con la ecuación [56].

Una vez que se conoce una relación entre la fracción de volumen de austenita formada y el tiempo, podemos calcular la fracción de volumen de austenita formada a una temperatura T durante el calentamiento continuo a una velocidad lineal media v_c . A partir de la ecuación [65] y aplicando logaritmos y derivando:

$$\ln\left(\frac{1}{1-V_{\gamma}}\right) = K_s t + K_e t^2 + K_c t^3$$
[69]

$$d\left(\ln\frac{1}{1-V_{\gamma}}\right) = \frac{dV_{\gamma}}{1-V_{\gamma}} = \left(K_{s} + 2K_{e}t + 3K_{c}t^{2}\right)dt$$
[70]

Si aplicamos el siguiente cambio de variable:

$$dt = \frac{dT}{v_c} \qquad t = \frac{\Delta T}{v_c}$$
[71]

$$\int_{0}^{V_{\gamma}} \frac{dV_{\gamma}}{1 - V_{\gamma}} = \int_{Ac_1}^{T} \left[K_s + 2K_e \frac{\Delta T}{v_c} + 3K_c \frac{(\Delta T)^2}{v_c^2} \right] \frac{dT}{v_c}$$
[72]

$$-\ln(1-V_{\gamma}) = \int_{Ac_{1}}^{T} \left[\frac{6.7}{v_{c}D} G(T) + \frac{53.4}{v_{c}^{2}D^{2}} G^{2}(T)(T-Ac_{1}) + \frac{150.8}{v_{c}^{3}D^{3}} G^{3}(T)(T-Ac_{1})^{2} \right] dT \quad [73]$$

donde Ac_1 es la temperatura de inicio de la transformación o la temperatura a partir de la cual la variación de energía libre de la transformación α/γ es negativa o temperatura que hace nula la función $\Delta g^{\alpha \to \gamma}(T)$.

Luego, las fracciones de volumen de las fases presentes en el calentamiento continuo de un acero ferrítico vendrían dadas a partir de las siguientes ecuaciones:

$$V_{\gamma} = 1 - \exp(-INT)$$
^[74a]

$$V_{\alpha} = 1 - V_{\gamma} \tag{74b}$$

donde:

$$INT = \int_{Ac_1}^{T} \left[\frac{6.7}{v_c D} G(T) + \frac{53.4}{v_c^2 D^2} G^2(T)(T - Ac_1) + \frac{150.8}{v_c^3 D^3} G^3(T)(T - Ac_1)^2 \right] dT$$
 [75]

Como en el capítulo anterior, la integral *INT* ha sido calculada numéricamente mediante el método trapezoidal.

3.3 Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros Ferríticos. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en Función de la Temperatura

El cálculo de las variaciones relativas de longitud en función de la temperatura en el proceso de austenización de un acero ferrítico se realiza de forma totalmente paralela al desarrollado en el apartado 2.3 del capítulo anterior pero, en el caso que nos ocupa, las fases presentes son ferrita y austenita.

Así, la ecuación [44] para el volumen inicial de la muestra se expresaría como sigue:

$$V_o = 2 * a_{\alpha_o}^3 \tag{[76]}$$

y el volumen de la misma a una temperatura T se calcularía de forma análoga a la ecuación [45],

$$V = V_{\alpha}(T) * 2 * a_{\alpha}^{3}(T) + V_{\gamma}(T) * a_{\gamma}^{3}(T)$$
[77]

Las fracciones de volumen de las fases austenita y ferrita, V_{γ} y V_{α} respectivamente, se calcularían mediante las ecuaciones [74a,b] obtenidas en el apartado anterior a partir del conocimiento de la cinética de nucleación y crecimiento de la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ en condiciones de calentamiento continuo.

Por otro lado, los parámetros de las redes de ferrita y austenita, así como los coeficientes de dilatación térmica lineal se calculan de forma análoga a como se hizo en el caso de aceros perlíticos.

Por tanto, la variación relativa de longitud de la muestra en condiciones de calentamiento continuo vendría dada por la fórmula:

$$\frac{\Delta L}{L_o} = \frac{V - V_o}{3V_o}$$
[78]

A partir de todas estas ecuaciones se ha desarrollado un programa informático en lenguaje Fortran 77 (Apéndice B) que permite obtener las variaciones relativas de longitud a cada temperatura entre 298 y 1273 K en un acero puramente ferrítico.

Los datos input del programa son:

- 1. Composición del acero: C, Si, Mn, Ni, Mo, Cr, N, Al, Co, Cu, Nb, Ti, V, W en % en peso.
- 2. Diámetro medio de grano ferrítico.
- 3. Velocidad de calentamiento.

El programa proporciona los siguientes resultados o datos output:

- 1. Fracción de ferrita y austenita presentes en la microestructura para toda temperatura entre 298 y 1273 K.
- Variación relativa de longitud de la muestra para toda temperatura entre 298 y 1273 K.

Tabla X.- Tamaño de grano ferrítico.

Aceros	Diámetro Medio, µm
Armco	158±28
C-0.25Mn	21±3
C-0.37Mn	63±11
C-0.50Mn	17±1

3.4 Resultados de Validación del Modelo de la Transformación Ferrita→Austenita en el Calentamiento Continuo.

La Tabla X muestra los diámetros medios de grano ferrítico de las microestructuras iniciales de los diferentes aceros ferríticos seleccionados para el estudio de la formación de austenita en condiciones de calentamiento continuo.



Figura 29.- Resultados experimentales y calculados para la formación de austenita en ferrita en el acero Armco.

Las Figuras 29 y 30 muestran, respectivamente, las curvas dilatométricas de calentamiento experimentales y calculadas del acero Armco y de los tres aceros C-Mn ultra bajos en carbono con diferente contenido en manganeso. Las curvas experimentales son curvas promedio de tres ensayos realizados bajo idénticas condiciones de calentamiento, y las curvas calculadas se han obtenido a partir del conocimiento de la cinética de la transformación ferrita-austenita en el calentamiento continuo y del volumen de las celdas presentes a una temperatura dada. En el cálculo, la composición del acero, el tamaño de grano de ferrita y la velocidad de calentamiento son los únicos datos iniciales necesarios.



Figura 30.- Resultados experimentales y calculados para la formación de austenita en ferrita en los tres aceros C-Mn estudiados.

La Figura 31 muestra comparativamente las temperaturas críticas experimentales y las calculadas de la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ para el acero Armco y los tres aceros aleados C-Mn. La línea de pendiente unidad en la gráfica representa el acuerdo perfecto entre ambos valores.



Figura 31.- Comparación de los valores experimentales y los calculados de la temperatura de inicio y final de la transformación.

Lo primero que se deduce de estos resultados es que la transformación ferritaaustenita es una transformación rápida pero, al parecer, no tan rápida como los cálculos predicen. Experimentalmente la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ transcurre en un rango de temperaturas de 10 a 20 K, mientras que ésta se desarrolla en tan sólo un grado de acuerdo con los cálculos.

Según los resultados de Speich et al. (1), la transformación ferrita-austenita se completa en 6 ms a 1223 K. Esta temperatura es del orden de la temperatura experimental de inicio de la transformación en el acero Armco (Figura 29). Como la velocidad de calentamiento aplicada en estos ensayos fue de 0.05 K/s, se requerirían 20 s para incrementar la temperatura de la muestra en un grado; luego, de acuerdo con

los resultados de Speich et al. (1), tras alcanzarse la temperatura de inicio de la transformación, ésta se completaría antes de incrementarse en un grado la temperatura de calentamiento. Sin embargo, experimentalmente y en condiciones de calentamiento continuo, una transformación tan rápida no es reproductible dilatométricamente.

Por otro lado, las temperaturas de inicio de la transformación ferrita-austenita, Ac_{I} , son más altas en las curvas experimentales que en las calculadas. Este hecho es más acentuado en los aceros C-Mn que en el hierro Armco. En este sentido, parece justificable que las temperaturas críticas experimentales sean siempre mayores que las temperaturas calculadas, ya sean éstas calculadas bajo consideraciones de equilibrio con o sin difusión de elementos aleantes durante la transformación, pues siempre existe un efecto de sobrecalentemiento debido a la influencia de la velocidad de calentamiento. Cuanto mayor es la velocidad de calentamiento mayor será la diferencia entre los resultados experimentales y los calculados (46,63). Por ello una velocidad de calentamiento lenta de 0.05 K/s fue empleada en estos ensayos con el fin de reproducir lo mejor posible las condiciones de equilibrio y minimizar su efecto sobre las temperaturas críticas. Por otra parte, las temperaturas críticas han sido calculadas en condiciones de equilibrio, pero con partición despreciable de elementos aleantes. Veamos si esa condición tiene implicaciones cinéticas que puedan justificar las diferencias entre los puntos críticos experimentales y calculados y si la consideración de equilibrio local con difusión de elementos aleantes reduciría dicha diferencia. Para ello, conviene recordar en primer lugar que la temperatura Ac_{l} o temperatura de inicio de la transformación α/γ , se define en la modelización como la temperatura a partir de la cual la variación de energía libre de la transformación $\Delta g^{\alpha \to \gamma}(T)$ es negativa. La Figura 32 muestra la variación de energía libre de Gibbs para la transformación ferrita-austenita, en ausencia de difusión de elementos aleantes, como una función de la temperatura para los aceros objeto de estudio en este trabajo. La temperatura de inicio de la transformación corresponderá al valor del eje x que hace nula la función.

De la Figura 32 se deduce que, de acuerdo con los cálculos propuestos por Aaronson et al. (58,59) el Mn reduce ligeramente la variación de energía libre de Gibbs de la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ a cualquier temperatura y, como consecuencia, en los aceros aleados la transformación se inicia a una temperatura Ac_1 menor que en el hierro puro.



Figura 32.- Variación de la energía libre de Gibbs en función de la temperatura para la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ desarrollada sin difusión de elementos aleantes en los aceros ferríticos estudiados.

Por otra parte, se han calculado también las temperaturas críticas de transformación considerando equilibrio total o difusión de los elementos aleantes en la transformación. Para ello se han empleado datos termodinámicos y un software desarrollado por The National Physical Laboratory denominado MTDATA (64) que interpreta dichos datos. La comparación entre las temperaturas Ac_1 y Ac_3 experimentales y calculadas, con y sin difusión de elementos aleantes, es mostrada en la Figura 33.

De esta comparación se deduce que la consideración de equilibrio con *partición* despreciable de elementos aleantes parece ser mejor aproximación que la de equilibrio total para el cálculo de la temperatura de inicio de la transformación. Para el caso de la temperatura Ac_3 o temperatura final, considerar difusión de elementos aleantes no parece influir de forma importante.



Figura 33.- Comparación de los valores experimentales y los calculados de la temperatura de inicio y final de la transformación bajo la consideración de difusión y no difusión de elementos aleantes.

Estos resultados permiten concluir que las diferencias encontradas en la temperatura Ac_1 son debidas al sobrecalentamiento y no a la consideración de un sistema de equilibrio u otro. De las Figuras 31 y 32 se deduce que el sobrecalentamiento en el inicio de la transformación es más alto en los aceros aleados que en el hierro puro, ello da lugar a una mayor desviación en la línea de pendiente unidad o desviación del equilibrio ya sea con difusión o sin difusión de elementos aleantes. Esto confirma que la presencia de solutos sustitucionales aumenta la temperatura de inicio de la transformación a austenita (63).

En cuanto a las diferencias en la temperatura Ac_3 son del mismo orden para el caso de difusión o no difusión de elementos aleantes. Ello confirma que las diferencias en las temperaturas finales de la transformación están directamente relacionadas con las dificultades para la reproducción dilatométrica de la transformación señaladas anteriormente. Por otro lado, de las Figuras 29 y 30 se deduce, que los coeficientes de dilatación térmica lineal obtenidos mediante el modelo de dilatación propuesto para la austenización de aceros ferríticos reproduce con gran aproximación la dilatación experimental de la fase austenítica una vez completada su formación. En cuanto a la ferrita, la pendiente de la curva calculada antes de iniciarse la transformación reproduce la dilatación experimental mejor para el caso del hierro puro (Armco) que para el caso de los aceros C-Mn. De esto se deduce que el efecto de los elementos aleantes en el parámetro de red de la ferrita debería ser considerado en el cálculo de igual forma que ha sido considerado para el parámetro de red de la austenita.

3.5 Conclusiones

- 2. El modelo considera el tamaño de grano de ferrita en la microestructura inicial para el cálculo de los lugares de nucleación ocupados instantáneamente, así como el efecto de la composición en la cinética de crecimiento de la austenita en la ferrita. El crecimiento es controlado por procesos en la intercara, debido a que en aceros ferríticos el movimiento de la intercara α/γ no supone ni deformacion, ni cambio de composición, sino sólo un cambio de fase.
- A partir del conocimiento de la cinética de la transformación ferrita-austenita y del volumen de las celdas a cada temperatura del calentamiento, se han calculado las curvas de dilatación de aceros ferríticos en condiciones de calentamiento continuo.

- 4. Ambos modelos han sido validados en un acero hierro Armco y en tres aceros C-Mn ultrabajos en carbono (0.01 % en peso) y con diferente contenido en Mn (0.25-0.50 % en peso). De la validación experimental de las curvas dilatométricas se concluye que la consideración de equilibrio local con *partición* despreciable de elementos sustitucionales o paraequilibrio en el estudio de la cinética de la transformación ha sido acertada, aunque existen algunas diferencias entre las temperaturas calculadas y los experimentales de inicio y final de la transformación.
- 5. Se ha encontrado que las diferencias entre las temperaturas Ac_1 calculadas y las experimentales son mayores en aceros C-Mn que en el hierro puro, lo que confirma que la presencia de solutos sustitucionales aumenta la temperatura de inicio de la transformación a austenita.
- 6. La transformación ferrita-austenita ha sido descrita en la literatura como una transformación masiva. Sin embargo, a partir de un estudio dilatométrico en condiciones practicas de calentamiento continuo no puede apreciarse con exactitud la rapidez con la que evoluciona dicha transformación.
- 7. El modelo de cálculo de los coeficientes de dilatación térmica lineal y el cálculo del parámetro de red de la austenita empleado en el modelo han sido validados experimentalmente con acierto. Sin embargo, se han detectado algunas diferencias en la dilatación de la ferrita que ponen de manifiesto que el efecto de los elementos aleantes debería ser tomado en consideración en el modelo para el cálculo del parámetro de red de la ferrita.

Capítulo 4

Austenización de un Acero con Microestructura Inicial Ferrita-Perlita

4.1 Consideraciones Generales

Los aceros comúnmente empleados en la industria del automóvil, son aceros de alta resistencia, de baja aleación o microaleados. Si se comparan las propiedades de los aceros microaleados con las de los aceros convencionales, se comprueba que, en general, los aceros microaleados presentan una mayor resistencia pero menor ductilidad. Sin embargo, en los años ochenta se demostró cómo la sustitución de la microestructura ferrita-perlita en aceros microaleados por una estructura ferrita-martensita daba lugar a una mejora sustancial de la ductilidad del acero. Los aceros que presentan una microestructura ferrita-martensita se conocen desde entonces como 'aceros dual' (65-67).

Los aceros dual se obtienen mediante la austenización parcial en la región del intercrítico de una microestructura ferrita-perlita, seguida de un enfriamiento rápido o temple. Durante el recocido intercrítico, se forma austenita que transformará a martensita en el temple posterior.

El descubrimiento de estos aceros dió lugar a que la austenización de una microestructura ferrita-perlita adquiriera un interés tecnológico importante y a que la

formación isotérmica de austenita fuera objeto de estudio desde entonces (17,18,68,69).

La formación de austenita en una microestructura ferrita-perlita tiene lugar, como para el resto de las estructuras iniciales estudiadas, por procesos de nucleación y crecimiento (9).

C.I. García y A.J. DeArdo (17) estudiaron la formación isotérmica de austenita en aceros 1.5 % Mn en peso con microestructura inicial ferrita-perlita, mediante recocidos isotérmicos en la región del intercrítico o región del diagrama de equilibrio en la cual la austenita se encuentra en equilibrio termodinámico con la ferrita. La evolución de la fase austenita en el recocido reveló que la austenita se formaba inicialmente en las regiones bandeadas de perlitas finas, o bandas de segregación de manganeso, y posteriormente se extendía al resto de las colonias perlíticas.

La austenita parecía nuclear en partículas de cementita localizadas o bien en las fronteras de colonias de perlitas o en las fronteras ferrita-perlita. Un resultado similar fue descrito por Speich et al (18) para la nucleación de austenita en aceros 1.5 % Mn en peso con contenidos en carbono de 0.06, 0.12 y 0.20 % en peso y con microestructura inicial ferrita-perlita. La nucleación de la austenita ocurría en las intercara ferrita-perlita de forma instantánea y esencialmente sin barrera de nucleación.

Como ya se mencionó para el caso de la nucleación de austenita en aceros perlíticos, a pesar de la gran cantidad de superficie entre láminas ferrita-cementita disponible para la nucleación en las colonias de perlita, dichas interfases parecen ser menos efectivas para la nucleación de austenita que las intercaras de colonias de perlita o intercaras ferrita-perlita. Takahashi (42) estimó a partir de datos experimentales de Sharma et al. (70) que la superficie entre láminas por unidad de volumen es alrededor de 300-600 veces mayor que la cantidad de superficie entre colonias de perlita por unidad de volumen. No se conoce todavía una explicación completa de por qué este último tipo de superficie es más efectiva en la nucleación de austenita. Sin embargo, se intuye que puede ser debido a que las uniones entre colonias de perlita o ferrita-perlita representan energías de intercara altas, en cuyo caso, la variación de energía libre cuando tales intercaras son eliminadas por la formación de un núcleo tiende a reducir proporcionalmente la energía de activación para la nucleación en ellas. Por supuesto, la energía de activación en tales lugares deberá ser suficientemente pequeña para justificar una nucleación más efectiva en ellos que en las fronteras entre láminas, a pesar de su alta densidad de lugares de nucleación.

Speich et al. (18) describieron el crecimiento de la austenita en el recocido intercrítico de aceros C-Mn con estructura inicial ferrita-perlita como un proceso que tiene lugar en tres etapas. La Figura 34 muestra un diagrama esquemático de las tres etapas de crecimiento de la austenita en aceros ferrítico-perlíticos.

En un primer estadio, e inmediatamente después de la nucleación de la austenita en la intercara ferrita-perlita, la austenita crece en la perlita hasta que ésta es completamente consumida. La velocidad de crecimiento en este estadio se supone controlada por la velocidad de difusión de carbono al otro lado de la intercara perlita-austenita. El carbono difunde a lo largo de la intercara perlita-austenita, y la distancia de difusión está directamente relacionada con el propio espaciado interlaminar de la perlita. Debido a la corta distancia de difusión, en perlitas finas se espera que la velocidad de crecimiento de la austenita en este estadio sea muy alta. Sin embargo a temperaturas bajas, como 1000 K, el crecimiento de la austenita puede ser controlado por la difusión más lenta de elementos sustitucionales como el manganeso, reduciéndose la velocidad de crecimiento de la austenita de forma significativa. Un ligero aumento de la temperatura puede entonces causar que el control de difusión de sustitucionales pase a ser de intersticiales, y provocar entonces un signicativo incremento en la velocidad de disolución de la perlita. De tal forma que los tiempos necesarios para completar la disolución de la perlita son del orden de 0.2 a 200 ms a temperaturas entre 1173 y1053 K, y pasan a ser de 15 s a 1h a temperaturas entre 1013 K y la temperatura del eutectoide en un acero C-Mn (18).

Cuando la perlita se ha disuelto por completo, la austenita queda altamente enriquecida en carbono y, por supuesto, en inequilibrio con la ferrita sin transformar que la rodea. Como consecuencia, en una segunda etapa, la austenita crecerá en la ferrita hasta alcanzar la fracción de volumen que el diagrama de equilibrio marque a la temperatura del recocido intercrítico aplicada. Ello tendrá lugar con o sin la *partición* de manganeso dependiendo de la fuerza motriz de la transformación (18,69). Si la transformación tiene lugar sin la distribución de manganeso entre las fases, la velocidad de crecimiento de la austenita será controlada por la difusión de carbono en esta fase y las fracciones de volumen finales y composiciones en la intercara vendrán dadas por el diagrama de paraequilibrio (71). El efecto global del Mn sobre la cinética de la transformación en tal caso corresponderá a la influencia que ejerce sobre el diagrama Fe-Fe₃C y a través de las interacciones ternarias de difusión (17).



Figura 34.- Esquema de las etapas del crecimiento de austenita durante recocido intercrítico de aceros ferrítico-perlíticos (18).

Purdy et al. (72) estudiaron la cinética de crecimiento de ferrita en austenita, caso inverso al que nos ocupa, y demostraron cómo el proceso controlador de la cinética de la transformación pasa de ser el de la difusión del carbono a ser el de la difusión del manganeso cuando el grado de sobresaturación decrece con la temperatura. De forma análoga, en el proceso de austenización a bajas temperaturas el grado de sobresaturación en la austenita es menor y el manganeso puede distribuirse durante el avance de la intercara austenita-ferrita. Si tenemos en cuenta que la velocidad de difusión del manganeso en la ferrita es casi tres órdenes de magnitud mayor que en la austenita, parece razonable suponer que el crecimiento en esta etapa sea controlado por la difusión del manganeso en la ferrita, en lugar de en la austenita.

En ambos casos, ya sea bajo consideraciones de paraequilibrio o de equilibrio, el crecimiento de la austenita en este segundo estadio es un crecimiento más lento que en el primero. A temperaturas entre 1123 y1173 K, el crecimiento de la austenita es controlado por la difusión del carbono en dicha fase y el tiempo necesario para completar la transformación ferrita-austenita oscila entre 2 y 9 s. Por otro lado, para temperaturas entre 1053 y 1013 K, el crecimiento de la austenita es controlado por la difusión del carbono de la austenita es controlado por la difusión ferrita-austenita oscila entre 2 y 9 s. Por otro lado, para temperaturas entre 1053 y 1013 K, el crecimiento de la austenita es controlado por la difusión del manganeso en la ferrita y el tiempo necesario para completar esta segunda etapa oscila entre 4 y 40 h.

Finalmente y en un tercer estadio, se produce la homogeneización en manganeso de ambas fases controlada por la difusión de este elemento en la austenita, pero sin un crecimiento adicional de la austenita en la ferrita. Los tiempos necesarios para completar este último proceso son del orden de 2000 a 4000 h de acuerdo a los cálculos de Speich et al (18).

La Figura 35 muestra un diagrama de formación de austenita calculado a partir de todas estas consideraciones teóricas para un acero 0.12C-1.5Mn en % en peso por Speich et al. (18).

Como en casos anteriores, todos estos autores (17,18,68,69) han estudiado la formación de austenita durante tratamientos isotérmicos, pero existe poca información acerca del proceso de austenización en aceros ferrítico-perlíticos sometidos a calentamiento continuo. En este trabajo se ha empleado la dilatometría de alta

resolución con el fin de estudiar la influencia de la morfología de la perlita en el proceso de disolución de la misma o primer estadio de la austenización de un acero bajo en carbono (0.11 % en peso) y de baja aleación en manganeso (0.50 % en peso) en condiciones de calentamiento continuo.



Figura 35.- Diagrama de formación de austenita de un acero 0.12C-1.5Mn (18).

Mediante esta técnica se ha podido diferenciar claramente la disolución de la perlita de la transformación ferrita-austenita cuando una perlita fina está presente en la microestructura inicial. Ello ha sido posible gracias a la detección de una contracción dilatométrica anómala al inicio de la austenización.

Se ha detectado también una segunda anomalía inmediatamente antes de que la austenización se complete. El estudio de los mecanismos que controlan la transformación perlita →austenita y la aplicación de un modelo cuantitativo para la formación de austenita a partir de ferrita han permitido encontrar el origen de ambas anomalías dilatométricas y, con ello, profundizar en el conocimiento e interpretación del proceso de austenización de aceros ferrítico-perlíticos.

Así, conocida la cinética completa de la transformación de austenización y mediante el cálculo de los volúmenes de las celdas presentes a cada temperatura, se ha podido modelizar la curva dilatométrica de calentamiento continuo de un acero 0.11C-0.50Mn en % en peso, y descubrir el significado de las anomalías detectadas experimentalmente.

Por otra parte, la posibilidad de diferenciar la disolución de la perlita de la transformación ferrita-austenita en microestructuras iniciales con perlitas finas ha permitido determinar, mediante dilatometría de alta resolución, la temperatura final de disolución de la perlita y así poder seleccionar la temperatura de intercrítico más adecuada para la obtención de una microestructura dual ferrita-martensita con las mejores propiedades mecánicas. Por el contrario, cuando la perlita presente en la microestructura inicial es una perlita grosera, la diferenciación de ambos procesos no es posible.

4.2 Modelización de la Transformación Ferrita+Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo. Fenómeno de Solapamiento.

En la austenización de una microestructura ferrita+perlita tienen lugar dos transformaciones, perlita-austenita y ferrita-austenita. La disolución de la perlita o formación de austenita a partir de perlita ha sido descrita y evaluada en un acero completamente perlítico en este trabajo.

Se ha estudiado la formación de austenita a partir de ferrita teniendo en cuenta que existe ya una fracción inicial de austenita, formada por la disolución previa de la perlita, que se encuentra con una concentración aproximada del 1 % C en peso (26,69). Debido a este enriquecimiento en carbono, la transformación ferrita—austenita no es análoga a la transformación descrita en el Capítulo 3. En el caso que ahora nos ocupa, la austenita formada a partir de la ferrita no presenta la misma concentración. La difusión del carbono controla la cinética de la transformación y el contenido de este elemento vendrá dado por el diagrama de equilibrio. Por otro lado, un proceso de nucleación no es necesario pues una fracción de austenita ya ha sido formada, sólo se requiere del crecimiento de los granos iniciales de austenita en la matriz ferrítica.

Como en los casos anteriores, las curvas dilatométricas de calentamiento continuo han sido modelizadas a partir del conocimiento de la evolución de las fracciones de volumen de las fases presentes en la microestructura como una función de la temperatura, y del conocimiento del volumen de las celdas. La cinética de formación de austenita desde la ferrita ha sido calculada en base al estudio isotérmico microestructural realizado por Datta et al. (21). Al igual que para otras microestructuras iniciales, tal información en el isotérmico ha sido adaptada al calentamiento continuo mediante una intergración en la temperatura.

Datta et al. (21) encontraron una relación lineal entre $\frac{V_{\gamma}^{\alpha}}{1-V_{\gamma}^{\alpha}}$ y el tiempo a temperaturas de recocido intercrítico de 1073, 1093 y 1113 K en un acero 0.15C-0.1Si-0.01S-0.02P (% en peso), donde V_{γ}^{α} representa la fracción de volumen de austenita formada a partir de la ferrita tras la disolución de la perlita. A estas temperaturas, una regresión por mínimos cuadrados de tales resultados experimentales nos daría la siguiente ecuación para la fracción de volumen de austenita formada a una temperatura dada como una función del tiempo:

$$\frac{V_{\gamma}^{\alpha}}{1 - V_{\gamma}^{\alpha}} = A + Bt$$
[79]

donde los valores de los parámetros A y B son los dados en la Tabla XI. El parámetro A no varía con la temperatura, mientras que B lo hace de forma significativa. De acuerdo con la Figura 36, la variación de B con la temperatura podría expresarse como sigue:

$$B = 3 \times 10^{-12} \left(T - T_a \right)^{4.6}$$
 [80]

donde T_a es la temperatura de inicio de la transformación ferrita-austenita. Inicialmente y con el fin de obtener una expresión para la función B(T), se ha supuesto que T_a corresponde a la temperatura Ac_1 teórica del acero. Tal aproximación es
perfectamente asumible si comparamos la cinética lenta de la transformación ferrita \rightarrow austenita con la disolución rápida de la perlita, la cual se inicia teóricamente a la temperatura Ac_1 .

Tabla XI.- Valores de A y B en la función propuesta por Datta et al. (21)

Temperatura, K	A	<i>B</i> , s ⁻¹
1073	0.22	1.89x10 ⁻³
1093	0.20	3.48x10 ⁻³
1113	0.20	14.6x10 ⁻³



Figura 36.- Variación del parámetro B con el sobrecalentamiento

A 1143 K, Datta et al. (21) detectaron una cinética de transformación diferente, una representación de los datos experimentales $\frac{V_{\gamma}^{\alpha}}{1-V_{\gamma}^{\alpha}}$ versus t no mostraba un comportamiento lineal como a temperaturas inferiores. Sin embargo, el comportamiento si que era lineal cuando se representaba $\frac{V_{\gamma}^{\alpha}}{1-V_{\gamma}^{\alpha}}$ versus t^2 .

$$\frac{V_{\gamma}^{\alpha}}{1 - V_{\gamma}^{\alpha}} = A' + B't^2$$
[81]

donde A'=0.25 y B'= 1.2×10^{-3} s⁻¹.

.

.

Si derivamos las expresiones de las fórmulas [79,81] con respecto al tiempo,

$$\frac{dV_{\gamma}^{\alpha}}{\left(1-V_{\gamma}^{\alpha}\right)^2} = Bdt \qquad \text{para } T < 1143 \text{ K}$$
[82]

$$\frac{dV_{\gamma}^{\alpha}}{\left(1-V_{\gamma}^{\alpha}\right)^2} = 2B'tdt \quad \text{para } T \ge 1143 \text{ K}$$
[83]

hacemos el siguiente cambio de variable,

$$t = \frac{T - T_a}{v_c}$$
[84]

e integramos con respecto a la temperatura, obtenemos:

$$\int_{0}^{V_{\gamma}^{\alpha}} \frac{dV_{\gamma}^{\alpha}}{\left(1 - V_{\gamma}^{\alpha}\right)^{2}} = \int_{a}^{T} \frac{3 \times 10^{-12} (T - T_{a})^{4.6}}{v_{c}} dT \qquad \text{para } T < 1143 \text{ K}$$
[85]

$$\int_{143}^{V_r^{\alpha}} \frac{dV_r^{\alpha}}{\left(1 - V_r^{\alpha}\right)^2} = \int_{143}^{T} \frac{2 \cdot 1.2 \times 10^{-3} \left(T - 1143\right)}{v_c^2} dT \qquad \text{para } T \ge 1143 \text{ K}$$
[86]

donde V_{1143} es la fracción de volumen de austenita formada a partir de la ferrita a 1143 K.

÷

La fracción de volumen de austenita formada a partir de la ferrita como una función de la temperatura se expresaría como sigue:

$$V_{\gamma}^{a} = 1 - \frac{5.6v_{c}}{3 \times 10^{-12} (T - T_{a})^{5.6} + 5.6v_{c}} \qquad \text{para } T < 1143 \text{ K} \qquad [87]$$

$$V_{\gamma}^{\alpha} = 1 - \frac{v_c^2 (1 - V_{1143})}{1.2 \times 10^{-3} (1 - V_{1143}) (T - 1143)^2 + v_c^2} \qquad \text{para } T \ge 1143 \text{ K} \qquad [88]$$

De acuerdo con los trabajos revisados en la bibliografía, la transformación ferrita→austenita tiene lugar inmediatamente después de la disolución de la perlita, de tal forma que cuando dicha transformación se inicia existe una fracción de volumen de austenita igual a la fracción de perlita presente en la microestructura inicial. Como ya se ha mencionado, todos estos trabajos experimentales estudian la formación de austenita en condiciones isotérmicas.

El calentamiento continuo, matemáticamente puede considerarse como una sucesión de tratamientos isotérmicos con una duración igual al inverso de la velocidad de calentamiento. Si la disolución de la perlita se inicia a la temperatura Ac_1 , y una transformación no se inicia hasta que la otra se ha completado, la transformación ferrita->austenita comenzará a esa misma temperatura o a otra superior, dependiendo del tiempo de mantenimiento a tal temperatura, es decir de la velocidad de calentamiento, y por otro lado de lo rápida que sea la transformación perlita->austenita. Sin embargo, también podríamos considerar que a una determinada temperatura de calentamiento, la microestructura puede estar constituida por la austenita formada a partir de la perlita en el estadio anterior, perlita por transformar y toda la ferrita inicial. En tal caso, no parece que exista ninguna razón física para que la austenita ya formada no pueda crecer en la ferrita y que la disolución de la perlita residual sea la única transformación que tenga lugar. Luego, en calentamiento continuo y a diferencia de lo que ocurre en un recocido intercrítico, parece razonable considerar el solapamiento de ambas transformaciones, es decir, la transformación simultánea de la perlita y la ferrita para formar austenita.

Desde un punto de vista matemático, un solapamiento de ambas fases supondría considerar en la ecuación [87] y [88] que $T_a = Ac_1$, y que la fracción inicial de austenita presente cuando la transformación ferrita-austenita se inicia es nula.

Según los procesos de transformación ya explicados, es imposible formar austenita a partir de ferrita sin la presencia de una austenita rica en carbono y procedente de la disolución de la perlita presente en la microestructura inicial. Sin embargo, la consideración matemática del solapamiento de las transformaciones requiere emplear las simplificaciones indicadas anteriormente. Por supuesto, la validación experimental ayudará a concluir cómo de acertada es dicha aproximación.

Las cinéticas de ambas transformaciones se calculan de forma independiente. Si la cinética de una de ellas es mucho más lenta que la otra, significaría que la fracción de austenita formada durante dicha transformación no es significativa a tal temperatura. Luego, son las cinéticas de ambas transformaciones las que indicarán cuando tiene lugar el solapamiento. La conexión entre ambas transformaciones ha sido establecida en el cálculo de las fracciones de volumen de las fases ferrita, cementita y austenita.

$$V_{\theta} = 0.12 V_{P_{\theta}} \left(1 - V_{\gamma}^{P} \right)$$
[89a]

$$V_{\alpha} = \left(1 - V_{\gamma}^{\alpha}\right) \cdot \left(1 - V_{P_{o}}\right) + 0.88V_{P_{o}}\left(1 - V_{\gamma}^{P}\right)$$
[89b]

$$V_{\gamma} = 1 - V_{\theta} - V\alpha \tag{89c}$$

donde V_{Po} es la fracción de volumen de perlita inicial y V_{γ}^{P} y V_{γ}^{α} son las fracciones de austenita formada a partir de perlita en un acero eutectoide (ecuación [38]) y a partir de ferrita (ecuaciones [87] y [88]), respectivamente. La perlita, como en casos anteriores, se considera constituida por 12 % de cementita y 88 % de ferrita.

En las ecuaciones anteriores [89a-c], V_{θ} es la fracción de volumen de cementita que queda por disolver a una temperatura dada en un acero con una fracción de volumen de perlita inicial V_{Po} . En tal definición se supone que el proceso de disolución de la perlita en un acero ferrítico-perlítico es análogo al de un acero eutectoide. Por otro lado, la

fracción de volumen de ferrita V_{α} se calcula como la ferrita residual tras la transformación ferrita-austenita (descrita en el trabajo de Datta et al (21)) modificada por la fracción de ferrita equiaxial existente, más la ferrita dentro de la perlita, teniendo en cuenta que la disolución de la perlita está en curso. La tercera y última fase del sistema es la austenita, cuya fracción de volumen se representa por V_{γ} y se expresa por la ecuación [89.c].

4.3 Modelización de la Curva Dilatométrica de Austenización de Aceros Ferrítico-Perlíticos. Cálculo de la Variación Relativa de Longitud en Función de la Temperatura

El cálculo de las variaciones relativas de longitud como una función de la temperatura para el caso de aceros ferrítico-perlíticos se realizaría de forma totalmente paralela al desarrollo del apartado 2.3. Como en el Capítulo 2, las fases presentes en el calentamiento son la ferrita, cementita y austenita.

Así la ecuación [44] para el volumen inicial de la muestra se expresaría como sigue:

$$V_o = (1 - 0.12 * V_{P_o}) * 2 * a_{\alpha_o}^3 + 0.12 * V_{P_o} * \frac{1}{3} * a_{\theta_o} * b_{\theta_o} * c_{\theta_o}$$
[90]

y el volumen de la misma a una temperatura T se calcularía de forma análoga a la ecuación [45],

$$V = V_{\alpha}(T) * 2 * a_{\alpha}^{3}(T) + V_{\theta}(T) * \frac{1}{3} * a_{\theta}(T) * b_{\theta}(T) * c_{\theta}(T) + V_{\gamma}(T) * a_{\gamma}^{3}(T)$$
[91]

Las fracciones de fase de ferrita, cementita y austenita se calcularían a partir de las expresiones [89a-c].

Por otro lado, los parámetros de las celdas, así como los coeficientes de dilatación térmica lineal se calculan de forma análoga a como se hizo en el caso de los aceros perlíticos y ferríticos.

Por tanto, la variación relativa de longitud de la muestra en condiciones de calentamiento continuo vendría dada por la expresión:

$$\frac{\Delta L}{L_o} = \frac{V - V_o}{3V_o}$$
[92]

A partir de todas estas ecuaciones se ha desarrollado un programa informático en lenguaje Fortran 77 (Apéndice C) que permite obtener las variaciones relativas de longitud a cada temperatura entre 298 y 1273 K en un acero ferrítico-perlítico.

Los datos input del programa son:

- 1. Composición del acero: C, Si, Mn, Ni, Mo, Cr, N, Al, Co, Cu, Nb, Ti, V, W en % en peso.
- 2. Fracción de volumen inicial de perlita, V_{Po}
- 3. Morfología de la perlita inicial: $\sigma_o y a^{\rho}$.
- 4. Velocidad de Calentamiento.

El programa proporciona los siguientes resultados o datos output:

- 1. Fracción de ferrita, cementita y austenita presentes en la microestructura para toda temperatura entre 298 y 1273 K.
- Variación relativa de longitud de la muestra para toda temperatura entre 298 y 1273 K.

4.4 Resultados de Validación del Modelo de la Transformación Ferrita+Perlita→Austenita en el Calentamiento Continuo.

La formación de austenita durante un calentamiento continuo tiene lugar entre las temperaturas Ac_1 y Ac_3 , las cuales representan respectivamente la temperatura inicial y final de la transformación ferrita+perlita-austenita (13). La variación relativa de longitud en función de la temperatura, representada esquemáticamente en la curva dilatométrica de la Figura 37, reproduce la contracción generalmente sufrida por un acero durante la formación de austenita en calentamiento continuo. El proceso de disolución de la perlita y la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ no se detectan de forma diferenciada en dicha figura.



Figura 37.- Esquema de la variación relativa de longitud en función de la temperatura en condiciones de calentamiento continuo.

Sin embargo, la curva dilatométrica experimental de calentamiento de la muestra TL (Figura 38) presenta dos contracciones anómalas, una al inicio y otra al final de la austenización. En lo sucesivo nos referiremos a ellas como ANOMALÍA1 y 2, respectivamente.

Por su situación al comienzo de la trasnformación de austenización, resultaría lógico presuponer que la ANOMALÍA1 quedara identificada como la respuesta dilatométrica asociada a la disolución de la perlita._Con_el_fin_de_demostrar_que_esta_anomalía_efectivamente correspondía a la transformación perlita->austenita se efectuaron los dos siguientes ensayos de calentamiento interrumpido por temple, una muestra de dilatométrica fue calentada a una temperatura 10 K superior a la temperatura del pico dilatométrico asociado a la anomalía y otra 10 K por debajo de_dicha_temperatura, e inmediatamente después fueron templadas a una velocidad aproximada de 500 K/s.



Figura 38.- Curva dilatométrica experimental de calentamiento de la muestra TL.

Las Figuras 39 y 40 muestran las microestructuras obtenidas en los ensayos de calentamiento interrumpido a las temperaturas mencionadas. A partir de la Figura 39 podemos concluir que diez grados antes de la temperatura de la ANOMALÍA1 no ha tenido lugar transformación alguna, pues la microestructura después del temple de interrupción del calentamiento está formada por ferrita y perlita, y no aparecen trazas de martensita.

Sin embargo, las áreas de martensita en la Figura 40 demuestran que la disolución de la perlita está teniendo lugar durante el calentamiento a temperaturas superiores a la temperatura del pico, confirmándose así, que la ANOMALÍAI está claramente asociada al proceso de disolución de la perlita.



(a) Micrografía óptica

(b) Micrografía electrónica



En ambas micrografías (Figuras 39 y 40) se observa un engrosamiento de la morfología laminar de la perlita, si se compara con la morfología correspondiente a la microestructura procedente del laminado (Figura 14(a)). Por otra parte, en algunas colonias de perlita, la cementita ha sufrido una ligera esferoidización antes de tener lugar la disolución (Figura 39(b)), comprobándose así los resultados de J.J. Yi et al. (73).



(a) Micrografía óptica





Por otro lado, con el fin de averiguar experimentalmente si existe solapamiento en el transcurso de las transformaciones perlita-austenita y $\alpha \rightarrow \gamma$, se ha comparado la fracción de volumen de ferrita equiaxial presente en la microestructura inicial de la muestra TL y en la calentada a 10 K por encima de Ac_1 (Micrografías 34(a) y 40(a)) encontrándose que existe un 89±4 por ciento de ferrita presente en la estructura inicial y un 76±4 por ciento después del pico o ANOMALÍA1. Ello demuestra que la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ se inicia antes de que finalice la disolución de la perlita y que ha sido acertado considerar el solapamiento en la modelización.

La Figura 41 representa la curva de calentamiento experimental de la muestra TL, promedio de once ensayos dilatométricos, junto a la curva calculada de acuerdo con el modelo que se describe en el apartado anterior para reproducir el comportamiento dilatométrico del proceso de austenización en calentamiento continuo de un acero ferrítico-perlítico.

La curva calculada muestra una primera anomalía al inicio de la austenización y a una temperatura similar a la de la ANOMALÍA1 detectada en la curva experimental. Además, se observa un ligero cambio de pendiente en la dilatación de la austenita a 1143 K una vez que la austenización ha concluido, pero no se detecta en la curva calculada una contracción como la de la ANOMALÍA2 de la curva experimental.



Figura 41.- Curva dilatométrica experimental y calculada para la muestra TL.

Así pues, bajo la consideración del solapamiento de las transformaciones perlita-austenita y $\alpha \rightarrow \gamma$, y a través del conocimiento de la cinética de disolución de la perlita y de la evolución cuantitativa de la austenita procedente de la ferrita, se ha conseguido reproducir la primera anomalía dilatométrica detectada en las curvas experimentales de un acero ferrítico-perlítico. Sin embargo, el cambio en la cinética de la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ que tiene lugar a 1143 K, según fue descrito por Data et al. (21), no reproduce ni justifica la ANOMALÍA2 detectada en las curvas experimentales.

Por otra parte, en la Figura 42 se muestra otra curva dilatométrica experimental de calentamiento de la misma muestra TL del acero objeto de este estudio. Esta curva fue registrada en un ensayo efectuado en un dilatómetro Bahr en la Delf University of Technology (74) con una muestra cilídrica hueca de 5 mm de diámetro, 10 mm de longitud y una pared de 0.3 mm, aplicando un nivel de vacío de 10^{-7} atm y una velocidad de calentamiento de 0.05 K/s.

A diferencia de la curva experimental de la Figura 41, registrada en un dilatómetro Adamel Lhomargy DT1000 con un nivel de vacío de 10^{-4} - 10^{-5} atm, la curva obtenida en la Delft University of Technology no presenta la anomalía final de la transformación, aunque, como en la curva calculada de acuerdo con el modelo propuesto en este trabajo, se aprecia un cambio en la pendiente de la dilatación de la austenita una vez finalizada la transformación, debido a un cambio en la cinética de la transformación (21).

De la diferencia entre los niveles de vacío de ambos equipos se deduce que la descarburación puede ser muy posiblemente el origen de la ANOMALÍA2. Los aceros bajos en carbono sufren transformaciones de calentamiento más largas debido al amplio campo bifásico α + γ que deben recorrer en su austenización, y son especialmente susceptibles a descarburarse en las temperaturas del intercrítico (75-77). Adicionalmente, la velocidad de calentamiento utilizada para la validación experimental del modelo, 0.05 K/s, es lo suficientemente lenta para que el proceso de austenización del acero se prolongue mucho y el riesgo de descarburación aumente. Niveles de vacío de 10⁻⁴-10⁻⁵ atm en condiciones normales de ensayo pueden llegar a ser insuficientes en tal caso.



Figura 42.- Curva dilatométrica experimental de la muestra TL realizada en Laboratory of Materials Science–Delft University of Technology, Holanda (74).

Con el fin de confirmar si la descarburación es el origen de la ANOMALÍA2, se ha incluido matemáticamente el efecto de la descarburación en el cálculo de la cinética de la austenización, y se ha comprobado si en la curva dilatométrica, en tal caso, aparece dicha anomalía al final de la transformación.

Del diagrama de equilibrio Fe-C (Figura 7) se deduce que aceros con un contenido en carbono menor presentan temperaturas Ac_3 más altas (linea GS), mientras que su temperatura Ac_1 no se ve modificada (temperatura T_e). Luego, la descarburación o pérdida de carbono en el acero, afectará principalmente a la cinética de la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$, ralentizando la cinética de la transformación y retrasando el final de la transformación a temperaturas más altas.

En términos matemáticos, una ralentización de la cinética de formación de la austenita supondría una modificación de la función B(T) (ecuación [80] y Figura 36), la cual condiciona la tendencia de formación de austenita a partir de ferrita como una función de la temperatura (ecuación [79]). Inicialmente, el efecto de la descarburación

fue considerado mediante la reducción en un orden de magnitud de la constante de proporcionalidad de la función B(T) en [79], que pasaría a expresarse como sigue:

$$B(T) = 3 \times 10^{-13} (T - T_a)^{4.6}$$
[93]

La Figura 43 muestra el parámetro B como una función del sobrecalentamiento, con y sin la corrección realizada por efecto de la descarburación. En ella se comprueba que la correccción por descarburación en el cálculo supone una reducción en la cinética de formación de la austenita como una función del sobrecalentamiento.



Figura 43.- Efecto de la descarburación en el parámetro cinético B.

Por otro lado, un aumento en la temperatura final de la transformación, consecuencia de fenómenos de descarburación, se traduciría en un aumento de la temperatura a la cual se produce el cambio en la cinética de la transformación (1143 K según Datta et al. (21)). Supongamos que dicha temperatura fuese elevada a 1173 K para tomar en consideración el efecto de la descarburación.

Si se calculara la curva dilatométrica de calentamiento de acuerdo con el desarrollo propuesto en el apartado 4.3, pero teniendo en cuenta las mencionadas modificaciones sobre la cinética de formación de austenita debido a la influencia de la descarburación, se obtendría la curva representada en la Figura 44.



Figura 44.- Curva dilatométrica experimental y calculada para la estructura inicial TL considerando el efecto de la descarburación en el cálculo.

Lo que en la curva calculada de la Figura 41 se apreciaba como un simple cambio de pendiente en la dilatación de la austenita, ahora se manifiesta como una contracción anómala. Como consecuencia, la ANOMALÍA2 si que aparece en la curva dilatométrica calculada cuando se considera un retraso anormal de la cinética de la transformación provocado por un fenómeno externo como es la descarburación. Ello confirma que la descarburación es el origen de esta segunda anomalía.

De estos resultados se deduce que tanto a partir del conocimiento de la cinética de disolución de perlita como de la formación de austenita en ferrita, éste último llevado a cabo en base a la adaptación y modificación de las propuestas efectuadas por Datta et al. (21), se ha podido averiguar el origen de ambas anomalías. Sin embargo, no existe un conocimiento preciso de la cinética de la transformación ferrita—austenita, pues la curva dilatométrica calculada entre ambas anomalías no reproduce fielmente la tendencia de la curva experimental. Ello se debe a que el modelo cuantitativo de Datta et al. (21) tiene fundamentalmente origen empírico y no está basado en una descripción matemática de la cinética que controla la transformación. Sin embargo y a pesar de estas

limitaciones, dicho modelo ha ayudado a encontrar el significado de las dos anomalías dilatométricas detectadas a nivel experimental.

4.5 Aplicaciones: Caracterización Dilatométrica de la Disolución de la Perlita en un Acero 0.11C-0.50Mn en % en peso

En este apartado estudiaremos la influencia de la morfología de la perlita en el proceso de disolución de la misma, o primer estadio de la austenización de un acero bajo en carbono y de baja aleación en manganeso (Tabla IV), en condiciones de calentamiento continuo. Para ello y tal como se indicaba en el apartado 1.3, fueron seleccionadas cinco microestructuras iniciales con igual fracción de volumen de perlita, pero con morfologías de perlita diferentes. Ellas fueron caracterizadas por los parámetros morfológicos recogidos en la Tabla V y por las microestructuras mostradas en las Figuras 13 y 14.

La Figura 45 muestra las curvas dilatométricas de calentamiento continuo a velocidad de 0.05 K/s de las muestras indicadas en la Tabla V. En esta figura se observa cómo la intensidad del pico de disolución de la perlita decrece cuando el espaciado interlaminar aumenta, llegando a desaparecer para espaciados interlaminares mayores de 0.25 μ m.

Cuando una transformación de fase del estado sólido tiene lugar en condiciones de calentamiento continuo, el cambio relativo de longitud registrado en la curva dilatométrica es resultado de dos efectos, la expansión térmica y el cambio dimensional asociado con la transformación de fase (78). Por tanto, el cambio relativo de longitud vendría dado a partir de la siguiente expresión:

$$\frac{\Delta L}{L_o} = \left(\frac{\Delta L_f}{L_o}\right)_{\substack{expansion \\ térmica}} + \left(\frac{\Delta L_p}{L_o}\right)_{\substack{transformación \\ de fase}}$$
[94]

$$\frac{\Delta L}{L_o} = \left(\alpha \ \Delta T\right)_{\substack{expansion \\ térmica}} + \left(\frac{\Delta L_p}{L_o}\right)_{\substack{transformación \\ de \ fase}}$$
[95]

donde $(\Delta L/L_o)$ es la variación relativa total de longitud, $(\Delta L_r/L_o)$ es la variación relativa de longitud debida a la expansión térmica, $(\Delta L_p/L_o)$ es la variación relativa de longitud debida a la transformación de fase, α es el coeficiente de expansión térmica lineal, y T es la temperatura en grados centígrados.



Figura 45.- Curvas experimentales dilatométricas de calentamiento continuo de las muestras indicadas en la Tabla V.

El término de la expansión térmica en la ecuación [95] siempre será positivo en condiciones de calentamiento continuo. Por otro lado, el cambio relativo de longitud debido a la transformación perlita \rightarrow austenita a una temperatura dada se calcularía a partir de la siguiente expresión (42, 79):

$$\frac{\Delta L_p}{L_o} = \frac{1}{3} \left[\frac{2a_{\alpha}^3 \left(V_{\alpha}' - V_{\alpha} \right) + \frac{a_{\theta} b_{\theta} c_{\theta}}{3} \left(V_{\theta}' - V_{\theta} \right) + a_{\gamma}^3 \left(V_{\gamma}' - V_{\gamma} \right)}{2a_{\alpha}^3 V_{\alpha} + \frac{a_{\theta} b_{\theta} c_{\theta}}{3} V_{\theta} + a_{\gamma}^3 V_{\gamma}} \right]$$
[96]

donde $a_{\alpha\gamma}^3$ y $(a_{\theta} b_{\theta} c_{\theta})$ es el volumen de la celda unidad de la ferrita, austenita y cementita, respectivamente, a la temperatura de reacción, $V_{\alpha,\gamma,\theta}$ es la fracción de volumen de ferrita, austenita y cementita, respectivamente, antes de la transformación, y $V_{\alpha,\gamma,\theta}^{'}$ es la fracción de volumen de ferrita, austenita y cementita, respectivamente, después de la transformación. Teniendo en consideración los valores de los volúmenes de las celdas unidad (42,49,50), podemos concluir que la variación relativa de longitud asociada a la transformación perlita—austenita durante el calentamiento desde la temperatura T a la temperatura $T+\delta T$ es siempre negativa.

Como consecuencia de todo lo anterior, la función $(\Delta L/L_o)=f(T)$ muestra un comportamiento lineal de pendiente constante y positiva para temperaturas anteriores a la disolución de la perlita; cuando la transformación perlita-austenita comienza, se observa una variación inmediata en la pendiente de la curva y, a medida que la transformación progresa, dicha pendiente llega a ser negativa.

El estudio teórico desarrollado en el Capítulo 2 para la cinética de crecimiento de la austenita en la perlita, demostró que la cinética de crecimiento de la austenita estaba controlada por un proceso de difusión en volumen de carbono en la austenita o por la difusión de los elementos aleantes sustitucionales a lo largo de la intercara perlitaaustenita dependiendo de la velocidad de calentamiento. En cualquier caso, la cinética de crecimiento de la austenita era inversamente proporcional al espaciado interlaminar de la perlita. De esta forma, perlitas finas, con un espaciado interlaminar pequeño, transforman más rápidamente a austenita y su disolución tiene lugar en un pequeño rango de temperaturas. En la ecuacion [95], el término ($\Delta L_p/L_o$) disminuirá rápidamente y un pico de contracción aparece en la curva de variación relativa de longitud.

Esta anomalía dilatométrica permite identificar la transformación perlita→austenita. Por tanto, si se obtuviera mediante un tratamiento de recocido apropiado una morfología de perlita suficientemente fina, sería posible la determinación exacta de la temperatura final de disolución de la perlita, y el conocimiento de la temperatura intercrítica más adecuada para la obtención de una microestructura dual ferrita-martensita con las mejores propiedades mecánicas.

4.6 Conclusiones

- Mediante dilatometría de alta resolución se ha detectado una contracción dilatométrica anómala al inicio de la austenización en un acero bajo en carbono (0.11 % en peso) y de baja aleación en manganeso (0.50 % en peso) con una microestructura inicial ferrita-perlita. Ensayos de calentamiento interrumpidos por temple han permitido demostrar que esta anomalía está asociada con el proceso de disolución de la perlita.
- 2. Por otro lado, se ha detectado una fuerte influencia del espaciado interlaminar en la forma de la propia anomalía dilatométrica. Este efecto está relacionado directamente con la influencia de dicho parámetro morfológico en la velocidad de crecimiento de la austenita en la perlita. La anomalía dilatométrica asociada a la transformación perlita→austenita desaparece cuando la microestructura inicial presenta una perlita grosera, de un espaciado interlaminar mayor de 0.25 µm.
- 3. La diferenciación entre el proceso de disolución de la perlita y la transformación α→γ permite determinar con exactitud las temperaturas de disolución del microconstituyente perlítico en este acero. La identificación exacta de la temperatura final de la disolución de la perlita, permitiría seleccionar la temperatura del intercrítico más adecuada para la obtención de una microestructura dual ferritamartensita con las mejores propiedades mecánicas.
- 4. Se ha detectado una segunda anomalía inmediatamente antes de que la austenización se complete. Debido al amplio rango bifásico $\alpha+\gamma$ que presentan los acero bajos en carbono, y a su especial susceptibilidad a la descarburación a temperaturas del intercrítico, se han encontrado problemas de descarburación en el calentamiento lento de este acero que pueden ser el origen de tal anomalía.
- 5. A través del estudio de los mecanismos que controlan la transformación perlita→austenita y de la aplicación de un modelo cuantitativo para la formación de

austenita a partir de la ferrita, modificado por el efecto de la propia descarburación, se ha podido comprobar que dicha descarburación es el origen de tal anomalía.

6. Los resultados obtenidos a través de los estudios antes mencionados han permitido justificar el origen de ambas anomalías; sin embargo, no existe un conocimiento preciso de la cinética de la transformación ferrita→austenita, pues la curva dilatométrica calculada entre ambas anomalías no reproduce fielmente la tendencia de la curva experimental. Ello se debe a que el modelo cuantitativo de Datta et al. tiene un origen fundamentalmente empírico y no está basado en una descripción matemática de la cinética que controla la transformación.

Conclusiones Generales

- Una microestructura completamente perlítica ha sido obtenida a tres temperaturas diferentes de transformación en un acero eutectoide aleado con Mn, encontrándose que el espaciado interlaminar de una microestructura perlítica formada isotérmicamente disminuye a medida que el subenfriamiento aumenta hasta alcanzar un valor mínimo o límite de 0.06 µm aproximadamente.
- 2. Se ha podido comprobar que para espaciados interlaminares menores de 0.08 μm, una caracterización de la perlita mediante un contraste de relieve y MEB puede llevar a conclusiones y medidas erróneas del espaciado interlaminar. Las deformaciones inducidas durante la preparación metalográfica de una perlita tan fina destruyen las láminas de cementita y hacen imposible una caracterización fiable de la muestra. En tal caso se aconseja medir el espaciado interlaminar mediante MET.
- 3. El modelo propuesto por Zener y Hillert para el cálculo de la variación del espaciado interlaminar como una función de la temperatura, así como la ecuación empírica de Takahashi para el cálculo de los parámetros termodinámicos de la reacción eutectoide han sido validados experimentalmente a tres temperaturas diferentes de transformación en el mismo acero, encontrándose un gran acuerdo entre los valores experimentales y los calculados cuando se considera en el modelo que el crecimiento es controlado por la difusión en volumen del carbono en la austenita.
- 4. Tres modelos matemáticos han sido propuestos para el cálculo de la fracción de volumen de austenita formada como una función de la temperatura en calentamiento

continuo de aceros aleados con niveles de carbono ultra-bajo, bajo y alto y microestructuras iniciales de ferrita, perlita y ferrita-perlita. La influencia de factores como la morfología de la perlita, el tamaño de grano ferrítico, la fracción de volumen de perlita inicial y la velocidad de calentamiento ha sido evaluada en los diferentes modelos y validada experimentalmente.

- 5. Las ecuaciones de Johnson-Mehl y Avrami, las cuales describen matemáticamente la cinética de una transformación en condiciones isotérmicas, han sido aplicadas con éxito en el cálculo de la fracción de volumen de austenita formada en condiciones de calentamiento continuo en los tres modelos.
- 6. Se ha propuesto un modelo que calcula la variación relativa de longitud como una función de la temperatura en el calentamiento continuo a partir del conocimiento de la cinética de las transformaciones que tienen lugar y de los parámetros de red y coeficientes de dilatación térmica de las fases presentes. El modelo ha sido validado en aceros aleados con niveles de carbono ultra-bajo, bajo y alto y microestructuras iniciales ferrita, perlita y ferrita-perlita.
- 7. Del estudio de validación del modelo propuesto para la austenización en aceros perlíticos en un amplio rango de espaciados interlaminares de perlita y velocidades de calentamiento, se ha podido encontrar una función morfológica para el cálculo de la velocidad de nucleación más completa que la existente hasta el momento en la literatura. Por otro lado, se ha podido comprobar cómo el mecanismo que controla la cinética de crecimiento varía dependiendo de la velocidad de calentamiento. De esta forma para velocidades superiores a 0.5 K/s, el mecanismo que regula el crecimiento de la austenita es la difusión en volumen de carbono en la austenita en lugar de la difusión de los elementos aleantes sustitucionales a lo largo de la intercara perlita-austenita.
- 8. De la validación experimental del modelo dilatométrico en un acero perlítico, para tres morfologías iniciales de perlita diferentes y tres velocidades de calentamiento, se concluye que el modelo reproduce con gran exactitud las temperaturas críticas

 Ac_1 y Ac_3 de las curvas dilatométricas así como las contracciones netas durante la transformación perlita-austenita. El coeficiente de dilatación y el cálculo del parámetro de red de la austenita empleado en el modelo pueden considerarse acertados. Sin embargo, el cálculo del coeficiente de dilatación lineal de la perlita, efectuado bajo la consideración de ser una microestructura formada por dos fases independientes con coeficientes de dilatación propios, no ha conducido a una buena aproximación.

- 9. El modelo propuesto para la austenización en aceros ferríticos ha sido validado en un acero hierro Armco y en tres aceros C-Mn ultrabajos en carbono (0.01 % en peso) y con diferente contenido en Mn (0.25-0.50 % en peso). De la validación experimental de las curvas dilatométricas se concluye que la consideración de equilibrio local con partición despreciable de elementos sustitucionales (paraequilibrio) en el estudio de la cinética de la transformación ha sido acertada, aunque existen algunas diferencias entre las temperaturas calculadas y las experimentales de inicio y final de la transformación.
- 10. Las diferencias entre las temperaturas Ac_1 calculadas y las experimentales son debidas al sobrecalentamiento o a la variación en las temperaturas críticas de transformación dependiendo de la velocidad de calentamiento. El sobrecalentamiento ha sido encontrado más alto en los aceros C-Mn que en el hierro puro, lo que confirma que la presencia de solutos sustitucionales retarda la transformación a austenita.
- 11. La transformación ferrita-austenita ha sido descrita en la literatura como una transformación masiva. Sin embargo, a partir de un estudio dilatométrico en condiciones finitas de calentamiento continuo no puede evaluarse la cinética de dicha transformación. Una transformación tan rápida como ésta, casi instantánea, es difícilmente reproductible mediante una técnica experimental que se basa en la variación que experimenta una propiedad macroscópica del material. A cualquier velocidad, por muy lenta que sea, esta transformación se registrará en el transcurso de un rango de temperatura y de tiempo muy pequeño, pero nunca nulo.

- 12. El coeficiente de dilatación y el cálculo del parámetro de red de la austenita empleados en el modelo han sido de nuevo validados experimentalmente con acierto para el caso de aceros ultra-bajos en carbono. Sin embargo, se han detectado algunas diferencias en la dilatación de la ferrita para el caso del acero Armco y de los aceros C-Mn, lo que pone de manifiesto que el efecto de los elementos aleantes debería ser tomado en consideración en el modelo para el cálculo del parámetro de red de la ferrita.
- 13. Mediante dilatometría de alta resolución se ha detectado una contracción dilatométrica anómala al inicio de la austenización en un acero bajo en carbono (0.11 % en peso) y de baja aleación en manganeso (0.50 % en peso) con una microestructura inicial de ferrita-perlita. Ensayos de calentamiento interrumpidos mediante temple han permitido demostrar que esta anomalía está asociada con el proceso de disolución de la perlita.
- 14. Ha sido observada una fuerte influencia del espaciado interlaminar en la forma de la propia anomalía dilatométrica. Este efecto está relacionado directamente con la influencia de dicho parámetro morfológico sobre la velocidad de crecimiento de la austenita en la perlita. La anomalía dilatométrica asociada a la transformación perlita→austenita es perfectamente detectada en la disolución de perlitas finas, pero desaparece cuando la microestructura inicial presenta una perlita grosera o de mayor espaciado interlaminar.
- 15. La diferenciación entre el proceso de disolución de la perlita y la transformación $\alpha \rightarrow \gamma$ permite determinar con exactitud las temperaturas de disolución de la perlita en este acero. La identificación exacta de la temperatura final de la disolución de la perlita, permitiría seleccionar la temperatura del intercrítico más adecuada para la obtención de una microestructura dual ferrita-martensita con las mejores propiedades mecánicas.
- 16. Se ha detectado una segunda anomalía inmediatamente antes de que la austenización se complete. Debido al amplio rango bifásico α +y que presentan los aceros bajos en

Ł

carbono, y a su especial susceptibilidad a la descarburación a temperaturas del intercrítico, se han encontrado problemas de descarburación en el calentamiento lento de este acero que pueden ser el origen de tal anomalía.

- 17. El estudio de los mecanismos que controlan la transformación perlita →austenita y la aplicación de un modelo cuantitativo para la formación de austenita a partir de ferrita, han permitido calcular las curvas dilatométricas de calentamiento de aceros con microestructura inicial ferrita-perlita. Incluyendo teóricamente el efecto de la descarburación en la cinética de la transformación se ha podido confirmar que la descarburación es el origen de tal anomalía.
- 18. La validación experimental de las curvas dilatométricas calculadas para aceros con una microestructura inicial ferrita-perlita ha demostrado que no existe un conocimiento preciso de la cinética de la transformación ferrita-austenita, pues la curva dilatométrica calculada entre ambas anomalías no reproduce la tendencia de la curva experimental. Ello se debe a que el modelo cuantitativo considerado en el cálculo no está basado en una descripción matemática de la cinética que controla la transformación. Sin embargo, dicho modelo si que ha ayudado a encontrar el significado de ambas anomalías dilatométricas.

Bibliografía

- (1) G.R. SPEICH y A. SZIRMAE, Trans. TMS-AIME, 245, 1969: 1063.
- (2) M. NEMOTO, Metall. Trans., 8A, 1977: 431-437.
- (3) A. ROOSZ, Z. GACSI y E.G. FUCHS, Acta Metall., 31, 1983: 509-517.
- (4) E. KULA y M. COHEN, Trans. AIME, 46, 1954: 727.
- (5) D. WEBSTER y G.B. ALLEN, Journ. of the Iron and Steel Inst., 200, 1962: 520.
- (6) R.A. GRANGE, Metall. Trans., 2, 1971: 65.
- (7) A. PORTEVIN y V. BERNARD, Journ. of the Iron and Steel Inst., 90, 1914: 204.
- (8) J.A. JONES, Journ. of the Iron and Steel Inst., 107, 1923: 439.
- (9) G.A. ROBERTS y R.F.MEHL, Trans. ASM, 31, 1943: 613.
- (10) G. MOLINDER, Acta Metall, 4, 1956: 565.
- (11) R.R. JUDD y H.W. PAXTON, Trans. TMS-AIME, 242, 1968: 206.
- (12) A. HULTGREN, Trans. ASST, 16, 1929: 227.
- (13) C. GARCÍA DE ANDRÉS, J.A. JIMENEZ y L.F. ALVAREZ, Metall. Trans., 7A, 1996: 1799.
- (14) M. BAEYERTZ, Trans. ASM, 30, 1942: 755.
- (15) M. HILLERT, K. NILSSON y L.E. TORNDAHL, Journ. of the Iron and Steel Inst, 209, 1971: 49.
- (16) S. KINOSHITA y R. UEDA, Trans. Iron Steel Inst. Jpn., 14, 1974: 411.
- (17) C.I. GARCÍA y A.J. DEARDO, Metall. Trans. 12A, 1981: 521.
- (18) G.R. SPEICH, V.A. DEMAREST y R.L. MILLER, Metall. Trans., 12A, 1981: 1419.
- (19) S. MATSUDA y Y. OKAMURA, Trans. Iron Steel Inst. Jpn., 14, 1974; 444.
- (20) A.M. GOKHALE, C.V. ISWARAN y R.T. DEHOFF, Metall. Trans, 11A, 1980: 1377.

123

- (21) D.P.DATTA y A.M. GOKHALE, Metall. Trans., 12A, 1981: 443.
- (22) S. DENIS, D. FARIAS y A. SIMON, ISIJ International, 32, No. 3, 1992: 316-325.
- (23) S.K. JAYASWAL y S.P. GUPTA, Z. Metallkd., 83, 1992: 11.
- (24) T. AKBAY, R.C. REED, C. ATKINSON y M. ENOMOTO en Proceedings of International Conference of Computer Assisted Material Design and Process Simulation (COMMP'93). Tokyo, 1993: 326.
- (25) F.J. VERMOLEN, P. VAN MOURIK y S. VAN DER ZWAAG, Materials Science and Technology, 13, 1997: 308.
- (26) E. NAVARA y R. HARRYSSON, Scripta Metallurgica, 18, 1984: 605-610.
- (27) S.F. DIRNFELD, B.M. KOREVAAR y F. VAN'T SPIJKER, Metall. Trans., 5, 1974: 1437.
- (28) W.A. JOHNSON y R.F. MEHL, Trans. AIME, 135, 1939. 416.
- (29) M. AVRAMI: 'Kinetics of Phase Change', 'Part I: General Theory'. Journ. Chem. Phys., 7, 1939: 1103. 'Part II: Transformation Time Relations for Random Distribution of Nuclei'. Journ. Chem. Phys., 8, 1940: 212. 'Part III: Granulation, Phase Change and Microstructure'. Journ. Chem. Phys., 9, 1941: 177.
- (30) J.R. VILELLA, G.E. GUELLICH y E.C. BAIN, Trans. ASM, 24, 1936: 225-252.
- (31) R.F. MEHL, C.S. BARRETT y D.W. SMITH, Trans. AIME, 105, 1933: 215.
- (32) C. ZENER, Trans. AIME, 167, 1946: 550.
- (33) J.G. COLREAVY, British Steel Technical Note, SL/PH/TN/9/-/92/A.
- (34) L.E. SAMUELS, 'Metallographic Polishing by Mechanical Method', 2nd ed.
 Pitman, London, 1971.
- (35) G.F. VANDER VOORT, 'Metallography. Principles and Practice', McGraw-Hill, New York, 1984.
- (36) E.E. UNDERWOOD, 'Quantitative Stereology', Addison-Wesley Reading, Massachusetts, 1970.
- (37) S.A. SALTYKOV, 'Stereometric Metallography', 2nd ed., Metallurgizdat, Moscow, 1958.
- (38) R.T. DEHOFF y F.N. RHINES, 'Quantitative Microscopy', McGraw-Hill, New York, 1968: 93.
- (39) C. GARCÍA DE ANDRÉS, C. CAPDEVILA, F.G. CABALLERO y H.K.D.H. BHADESHIA, Scripta Materiallia, 39, 1998: 853.

124

- (40) M. HILLERT, Jernkont. Ann., 141, 1957: 757.
- M. HILLERT, 'The Mechanism of Phase Transformation in Crystalline Solids', Institute of Metals, London, 1969: 231-247.
- (42) M. TAKAHASHI, 'Reaustenitization from Bainite in Steels', Tesis de University of Cambridge, 1992: 132.
- (43) I.W. CHRISTIAN, 'The Theory of Transformations in Metals and Alloys', Pergamon Press, Oxford, 1965.
- T.M.R. ELLIS, 'Fortran 77. Programing', 2nd Ed., Addison-Wesley Publising Co., New York, 1990.
- (45) K.W. ANDREWS, Journ. of the Iron and Steel Inst, 203, 1965: 721-727.
- (46) A.K. SINHA, 'Ferrous Physical Metallurgy', Butterworths, Boston, 1989: 10.
- (47) H. STUART y N. RIDLEY, Journ. of the Iron and Steel Inst, 204, 1966: 711.
- (48) C. GARCÍA DE ANDRÉS, F.G. CABALLERO, C. CAPDEVILA, y H.K.D.H. BHADESHIA, Scripta Materiallia, 39, 1998: 791.
- (49) N. RIDLEY, H. STUART y L. ZWELL, Trans. AIME, 245, 1969: 1984.
- (50) D.J. DYSON y B. HOLMES, Journ. of the Iron and Steel Inst, 208, 1970: 469.
- (51) F.S. LEPERA, Journ. of Metals, 32, 1980: 38-39.
- (52) C. GARCÍA, L.F. ALVAREZ y M. CARSÍ, Welding International, 6, 1982: 612.
- (53) D.A. PORTER y K.E. EASTERLING, 'Phase Transformations in Metals and Alloys', 2nd ed., Chapman and Hall, London, 1992.
- (54) N.C. LAW y D.V. EDMONDS, Metall. Trans., 11A, 1980: 33.
- (55) J.R. YANG y H.K.D.H. BHADESHIA, Materials Science and Engineering, A131, 1991: 99-113.
- (56) J.W. CAHN, Acta Metall., 4, 1956: 449.
- (57) R.F. BUNSHAH y R.F. MEHL, Trans. TMS-AIME, 197, 1953: 1251-1258.
- (58) H.I. AARONSON, H.A. DOMIAN y G.M. POUND, Trans. TMS-AIME, 236, 1966: 753.
- (59) H.I. AARONSON, H.A. DOMIAN y G.M. POUND, Trans. TMS-AIME, 236, 1966: 768.
- (60) P. SHEWMON, 'Diffusion in Solids', McGraw-Hill Book Co., New York, 1963.
- (61) L. KAUFMAN, E.V. CLOUGHERTY y R.J. WEISS, Acta Metall, 11, 1963: 323.
- (62) C. ZENER, Trans. AIME, 203, 1955: 619.

- (63) L. GAVARD, H.K.D.H. BHADESHIA, D.J.C. MACKAY y S. SUZUKI, Materials Science and Technology, 12, 1992: 453.
- (64) S.M. HODSON, MTDATA-Metallurgical and Thermomechanical Databank, National Physical Laboratory, Teddington, UK, 1989.
- (65) G. KRAUSS, 'Steels: Heat Treatment and Processing Principles', ASM International, Ohio, 1989: 274.
- (66) A. GUSTAVSON, D.L. MCDOWELL, A. MELANDR y M. LARSSON, Inst. Metallforsk. Forsk. Rapp., 88, 1994, 3145.
- (67) V.L. GADGEEL, Tool Alloy Steels, 28, 1994: 17.
- (68) M.M. SOUZA, J.R.C. GUIMARAES y K.K. CHAWLA, Metall. Trans., 13A, 1982: 575.
- (69) XUE-LING CAI, A.J. GARRAT-REED y W.S. OWEN, Metall. Trans., 16A, 1985: 543.
- (70) R.C. SHARMA, G.R. PURDY y J.S. KIRKALDY, Metall. Trans., 10A, 1979: 1129.
- (71) J.B. GUILMOUR, G.R. PURDY y J.S. KIRKALDY, Metall. Trans., 3, 1972: 1455-1464.
- (72) G.R. PURDY, O.H. REICHERT y J.S. KIRKALDY, Trans. TMS-AIME, 220, 1964: 1025-1034.
- (73) JOON JEONG YI, IN SUP KIM y HYUNG SUP CHOI, Metall. Trans., 16A, 1985: 1237.
- (74) CAIAN QIU y S. VAN DER ZWAAG, 'Improvement of Hot-Rolled Product by Physical and Mathematical Modelling', European Coal and Steel Commission (ECSC) 7210.EC/807, Technical Report No.3, British Steel plc., Enero 1996, Apéndice 2.
- (75) J.A. KOWALIK y A.R. MARDER, 'Phase Transformation'97', The Institute of Metals, London, 1988: 482.
- (76) P.J. ADZEMA y D.J. KNIGHT, Trans. ASM, 56, 1963: 576.
- K.M. GORMAN y A.R. MARDER, 'Solid-Solid Phase Transformations', H.I. Aaronson, TMS-AIME, Warendale, USA, 1982: 825.
- (78) C. GARCÍA DE ANDRÉS, F.G. CABALLERO y C. CAPDEVILA, Scripta Materiallia, 38, 1998: 1835.

126

(79) H.K.D.H. BHADESHIA, Metal Science, 16, 1982: 159.

٠.

Apéndice A

C Programa diseñado para calcular las variaciones relativas de longitud como una

C función de la temperatura a partir del conocimiento de la evolución de las fracciones

C de volumen de las fases presentes en el calentamiento continuo de un acero

C eutectoide.

C Nomenclatura:

C FVAA = fracción de volumen de austenita

C VCE = fracción de volumen de cementita

C VF = fracción de volumen de ferrita

C C = contenido en carbono en % en peso

C SI = contenido en silicio en % en peso

C MN = contenido en manganeso en % en peso

C NI = contenido en níquel en % en peso

C CR = contenido en cromo en % en peso

C N = contenido en nitrógeno en % en peso

C AL = contenido en aluminio en % en peso

C CO = contenido en cobalto en % en peso

C CU = contenido en cobre en % en peso

C MO = contenido en molibdeno en % en peso

C NB = contenido en niobio en % en peso

C TIT = contenido en titanio en % en peso

C V = contenido en vanadio en % en peso

C W = contenido en volframio en % en peso

C S = espaciado interlaminar de la perlita

C AP = longitud de borde de intercara de colonia de perlita

C VC = velocidad de calentamiento

C P = fracción de volumen inicial de perlita

C VFI, VCI = fracciones de volumen iniciales de ferrita y cementita, respectivamente

C AC1 = temperatura de inicio de la transformación en grados centígrados

C TC= temperatura de inicio de la transformación en grados Kelvin

C AAO, AFO, ACO, BCO. CCO = parámetros de red en Å de la austenita, ferrita y

C cementita respectivamente, a temperatura ambiente

C BA, BF, BEC = coeficientes lineales de dilatación térmica de la austenita, ferrita y

C cementita, respectivamente.

C AA, AF, ACT, BC, CC = parámetros de red en Å de la austenita, ferrita y cementita

C respectivamente, a una temperatura T cualquiera

C VCALOW, VCFLOW, VCCLOW = volumen de las celdas unidad a temperatura C ambiente.

C VLOW volumen inicial de la muestra

C VCA, VCF, VCC = volumen de las celdas a una temperatura T cualquiera

C VTOT = volumen de la muestra a una temperatura T cualquiera

C FVA = fracción de volumen de austenita formada a partir de la perlita

C LEN = variación relativa de longitud a una temperatura T cualquiera

С

IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z), INTEGER(I,J)

DOUBLE PRECISION FVAA(1000),VCE(1000),VF(1000) DOUBLE PRECISION C, SI, MN, NI, CR, N, AL, CO, CU, MO DOUBLE PRECISION NB, TIT, V, W, S, AP,VC, P, AC1, TC DOUBLE PRECISION AAO, AFO, ACO, BCO, CCO, BA, BF, BEC DOUBLE PRECISION AA, AF, ACT, BC, CC DOUBLE PRECISION VCALOW, VCFLOW, VCCLOW, VLOW DOUBLE PRECISION VCA, VCF, VCC, VTOT, FVA, LEN

С

OPEN(UNIT=5,FILE='ineut') READ(5,*)C READ(5,*)SI READ(5,*)MN READ(5,*)NI READ(5,*)AC READ(5,*)CR READ(5,*)AL READ(5,*)AL READ(5,*)CU READ(5,*)CU READ(5,*)NB READ(5,*)V READ(5,*)W READ(5,*)AP READ(5,*)AP

С

C Cálculo de la composición del acero en fracción molar

С

AC=C/12.011 ASI=SI/28.086 14 AMN=MN/54.938 ANI=NI/58.71 AMO=MO/95.94 ACR=CR/51.996 AN=N/14.006 AAL=AL/26.981 ACO=CO/58.933 ACU=CU/63.54 ANB=NB/92.906 ATIT=TIT/47.90 AV=V/50.942 AW=W/183.85 FE1=C+SI+MN+NI+MO+CR+N

÷

FE2=AL+CO+CU+NB+TIT+V+W FE=100.0-FE1-FE2 AFE=FE/55.847 M1=AC+ASI+AMN+ANI+AMO+ACR+AN+AAL M2=ACO+ACU+ANB+ATIT+AV+AW+AFE M=M1+M2MC=AC/M MSI=ASI/M MMN=AMN/M MNI=ANI/M MMO=AMO/M MCR=ACR/M MNT=AN/M MAL=AAL/M MCO=ACO/M MCU=ACU/M MNB=ANB/M MTI=ATIT/M MV=AV/M MW=AW/M MFE=AFE/M

С

PRINT *,'Running, wait for a minute please...' OPEN(UNIT=6,FILE='DATA')

WRITE(6,1111)

WRITE(6,1112)

C Microestructura inicial 100 % perlita

P=1.0D+00 VCI=0.12D+00*P VFI=1.0D+00-VCI AC1=723-10.7*MN-16.9*NI+29.1*SI+16.9*CR+6.38*W TC=AC1+273.0D+00 С

C Cálculo de los parámetros de red en Å de las celdas unidad a temperatura ambiente

C Austenita

AAO1=3.573+0.033*C+0.00095*MN-0.0002*NI+0.0006*CR AAO2=0.0031*MO+0.0018*V AAO=AAO1+AAO2

С

C Cementita

ACO=4.5246D+00 BCO=5.0884D+00 CCO=6.7423D+00

С

C Ferrita

AFO=2.866

С

C Cálculo de los coeficientes de dilatación térmica de las celdas unidad.

```
BF=1.244D-05
BA=2.065D-05
```

С

C El coeficiente de dilatación térmica de la cementita varía con la temperatura

С

C ILOW e IHIGH son las temperaturas inicial y final del calentamiento

C son dadas en K.

```
ILOW=300
IHIGH=1273
```

С

C Fracciones de volumen de las fases a 300K

```
FVAA(1)=0
VCE(1)=VCI
VF(1)=VFI
```

С

C Cálculo del volumen de las celdas a ILOW

AA=AAO*(1+(BA*(ILOW-300))) AF=AFO*(1+(BF*(ILOW-300))) BEC=6.0D-06+3.0D-09*(ILOW-273)+1.0D-11*(ILOW-273)**2 ACT=ACO*(1+(BEC*(ILOW-300))) BC=BCO*(1+(BEC*(ILOW-300))) CC=CCO*(1+(BEC*(ILOW-300))) VCFLOW=AF**3 VCALOW=AA**3 VCCLOW=ACT*BC*CC

С

C Cálculo del volumen de la muestra a ILOW

С

C Cálculo del volumen de la muestra a cualquier temperatura

С

C Cálculo de los volúmenes de las celdas unidad

С

C Cálculo de los volúmenes de las fases a cualquier temperatura

CALL FRACTION(FVA,T,S,AP,VC,TC)

С

.

ł

	FVAA(i)=FVA*P	
	VCE(i)=0.12*(P-FVAA(i))	1 1
	VF(i)=1.0-FVAA(i)-VCE(i)	
	VTOT=2*VCF*VF(i) + VCA*FVAA(i) + (VCC/3)*VCE	(i)-(VLOW)
	VTOT=VTOT/(VLOW)	
С		
C Cálcu	lo de la variación relativa de longitud	1
	LEN=(VTOT)/3.0D+00	
	WRITE(6,31)T-273, LEN, VF(i), VCE(i), FVAA(i)	
С		
1	CONTINUE	
	CLOSE(6)	
31	FORMAT(5X,F5.0,5X,F10.6,5X,E14.5,5X,E14.5,5X,E14.5)	
1111	FORMAT('Centigrade',8x,'Strain',11x,'Ferrite',11x,'Pearlite',	
&	11x,'Austenite')	1
1112 F	ORMAT('	······,
&	'~~~~~~')	i
	STOP	1
	END ,	:
С		
C****	************	****
С		
C Subru	tina que calcula la fracción de volumen de austenita formada e	en el
C calent	amiento continuo a partir del conocimiento de la cinética de n	ucleación y de
C crecin	niento de la austenita dentro de la perlita mediante la integració	ón de la ecuación
C de Av	rami de orden cuatro	
C Nomenclatura:		!
C S = es	paciado interlaminar de la perlita	
C AP =	longitud de borde de intercara de colonia de perlita	
C TC =	temperatura de inicio de la transformación en K	ı
C VC =	velocidad de calentamiento	
C FVA =	= fracción de volumen de austenita formada	:
		1
		1

-

.
1	•
L	

SUBROUTINE FRACTION(FVA,T,S,AP,VC,TC) IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z), INTEGER(I,J) DOUBLE PRECISION S, AP, VC, TC, T, DELX, Y DOUBLE PRECISION ENT, TC1, ENT1, F, FVA

С

IF(T .LT. TC) RETURN

С

C Cálculo numérico de la integral de la función F

J=1000 DELX=(T-TC)/REAL(J) T=TC ENT=0.0 DO 10 I=1, J-1 T=T+DELX

Y=F(T,TC,S,AP,VC)

ENT=ENT+Y

10 CONTINUE

TC1=TC+1.0D+00 ·

ENT1=F(TC1,TC,S,AP,VC)+F(T,TC,S,AP,VC)

ENT=DELX*(ENT1/2.0+ENT)

FVA=1.0D+00-DEXP(-ENT)

RETURN

END

С

C Función F a integrar

C N es la velocidad de nucleación

C G es la velocidad de crecimiento

DOUBLE PRECISION FUNCTION F(TT,TI,S,AP,VC) DOUBLE PRECISION S, AP, VC, PI, K, Z, N1, N2, N, G DOUBLE PRECISION COM, TI, TT

```
IF (VC .GT. 0.5D+00) THEN
G=((1.0D-10)/(S**1))*DEXP(-29.7D+00/Z)
ELSE
G=((1.0D-10)/(S**2))*DEXP(-29.7D+00/Z)
ENDIF
COM=N*(G**3)*(Z**3)
F=K*COM
```

N2=(0.3514*VC)-(0.1384*DLOG(1.00D+00/N1))+4.1414

N=((1.0D-11)/(N1**(N2)))*DEXP(-25.38D+00/Z)

PI=3.1416D+00

N1=S*AP*AP

Z=TT-TI

RETURN

END

K=(4*PI)/(3*(VC**4))

I

Apéndice B

C Programa diseñado para calcular las variaciones relativas de longitud como una

C función de la temperatura a partir del conocimiento de la evolución de las fracciones

C de volumen de las fases presentes en el calentamiento continuo de un acero

C ferrítico

C Nomenclatura:

C FVAA = fracción de volumen de austenita

C VF = fracción de volumen de ferrita

C C =contenido en carbono en % en peso

C SI = contenido en silicio en % en peso

C MN = contenido en manganeso en % en peso

C NI = contenido en níquel en % en peso

C CR = contenido en cromo en % en peso

C N = contenido en nitrógeno en % en peso

C AL = contenido en aluminio en % en peso

C CO = contenido en cobalto en % en peso

C CU = contenido en cobre en % en peso

C MO = contenido en molibdeno en % en peso

C NB = contenido en niobio en % en peso

C TIT = contenido en titanio en % en peso

C V = contenido en vanadio en % en peso

C W = contenido en volframio en % en peso

C D = diámetro medio de grano ferrítico

C VC = velocidad de calentamiento

C T10, T20 = efecto de los elementos aleantes en la variación de energía libre de la C transformación ferrita-austenita

C AAO, AFO = parámetros de red en Å de la austenita y ferrita, respectivamente

C a temperatura ambiente

C BA, BF = coeficientes lineales de dilatación térmica de la austenita y ferrita C respectivamente.

C AA, AF = parámetros de red en Å de la austenita y ferrita, respectivamente

C a una temperatura T cualquiera

C VCALOW, VCFLOW = volumen de las celdas unidad a temperatura ambiente.

C VLOW volumen inicial de la muestra

C VCA, VCF = volumen de las celdas a una temperatura T cualquiera

C VTOT = volumen de la muestra a una temperatura T cualquiera

C FVA = fracción de volumen de austenita formada a partir de ferrita de la misma C composición

C LEN = variación relativa de longitud a una temperatura T cualquiera C

> IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z), INTEGER(I,J) DOUBLE PRECISION FVAA(1000),VF(1000) DOUBLE PRECISION C, SI, MN, NI, CR, N, AL, CO, CU, MO DOUBLE PRECISION NB, TIT, V, W, D,VC, P, T10, T20 DOUBLE PRECISION AAO, AFO, BA, BF, AA, AF DOUBLE PRECISION VCALOW, VCFLOW, VLOW DOUBLE PRECISION VCA, VCF, VTOT, FVA, LEN

С

OPEN(UNIT=5,FILE='infer') READ(5,*)C READ(5,*)SI READ(5,*)MN READ(5,*)NI READ(5,*)MO READ(5,*)CR READ(5,*)N

Apéndice B

READ(5,*)AL READ(5,*)CO READ(5,*)CU READ(5,*)NB READ(5,*)TIT READ(5,*)V READ(5,*)W READ(5,*)D READ(5,*)VC

С

C Cálculo de la composición del acero en fracción molar

С

AC=C/12.011 ASI=SI/28.086 AMN=MN/54.938 ANI=NI/58.71 AMO=MO/95.94 ACR=CR/51.996 AN=N/14.006 ۰. AAL=AL/26.981 ACO=CO/58.933 ACU=CU/63.54 ANB=NB/92.906 ATIT=TIT/47.90 AV=V/50.942 AW=W/183.85 FE1=C+SI+MN+NI+MO+CR+N FE2=AL+CO+CU+NB+TIT+V+W FE=100.0-FE1-FE2 AFE=FE/55.847 M1=AC+ASI+AMN+ANI+AMO+ACR+AN+AAL M2=ACO+ACU+ANB+ATIT+AV+AW+AFE

Apéndice B

M=M1+M2 MC=AC/M MSI=ASI/M MMN=AMN/M MNI=ANI/M MMO=AMO/M MCR=ACR/M MCR=ACR/M MAL=AAL/M MAL=AAL/M MCO=ACO/M MCU=ACU/M

MTI=ATIT/M

MV=AV/M MW=AW/M MFE=AFE/M

С

PRINT *,'Running, wait for a minute please...' OPEN(UNIT=6,FILE='DATA') WRITE(6,1111) WRITE(6,1112)

С

C Microestructura inicial 100 % ferrita

С

C Efecto de los elementos aleantes en la variación de la energía libre

C de la transformación ferrita-austenita

С

T20=-3*MSI-37.5*MMN-6*MNI-26*MMO-19*MCR-44*MV T20=T20+19.5*MCO+8*MAL+4.5*MCU T10=MSI*(-3)+MMN*2+MNI*12+MMO*(-9)+MCR*(-1)+ T10=T10+MV*(-12)+3.5*MCO-7*MAL+16*MCU C Cálculo de los parámetros de red en Å de las celdas unidad a temperatura ambiente

C Austenita

AAO1=3.573+0.033*C+0.00095*MN-0.0002*NI+0.0006*CR AAO2=0.0031*MO+0.0018*V AAO=AAO1+AAO2

С

C Ferrita

AFO=2.866

С

C Cálculo de los coeficientes de dilatación térmica de las celdas unidad.

```
BF=1.244D-05
BA=2.065D-05
```

С

C ILOW e IHIGH son las temperaturas inicial y final del calentamiento C son dadas en K.

> ILOW=300 IHIGH=1273

С

C Fracciones de volumen de las fases a 300K

```
FVAA(1)=0
VF(1)=VFI
```

С

C Cálculo del volumen de las celdas a ILOW

```
AA=AAO*(1+(BA*(ILOW-300)))
AF=AFO*(1+(BF*(ILOW-300)))
VCFLOW=AF**3
VCALOW=AA**3
```

С

C Cálculo del volumen de la muestra a ILOW

С

C Cálculo del volumen de la muestra a cualquier temperatura

```
DO 1 ij = ILOW, IHIGH, 1
T=ij
i=ij-ILOW+1
```

С

C Cálculo de los volúmenes de las celdas unidad

С

C Cálculo de los volúmenes de las fases a cualquier temperatura

CALL FRACTION(FVA,T,D,VC,TC,T10,T20)

С

```
FVAA(i)=FVA
VF(i)=1.0-FVAA(i)
VTOT=2*VCF*VF(i) + VCA*FVAA(i) - (VLOW)
VTOT=VTOT/(VLOW)
```

С

C Cálculo de la variación relativa de longitud

LEN=(VTOT)/3.0D+00

```
WRITE(6,31)T-273, LEN, VF(i), FVAA(i)
```

1 CONTINUE

CLOSE(6)

- 31 FORMAT(5X,F5.0,5X,F10.6,5X,E14.5,5X,E14.5)
- 1111 FORMAT(' Centigrade',8x,'Strain',11x,'Ferrite',11x,'Austenite')
- 1112 FORMAT('------

&'-----')

STOP END

С

~

С

С

-----!

С

C Subrutina que calcula la fracción de volumen de austenita formada en el

C calentamiento continuo a partir del conocimiento de cinética de nucleación y de

C crecimiento de la austenita en ferrita de igual composición mediante la integración de

C la ecuación de Johnson y Mehl en condiciones de saturación en intercaras, bordes y

C esquinas

C Nomenclatura:

C D = diámetro medio de grano ferrítico

C VC = velocidad de calentamiento

C FVA = fracción de volumen de austenita formada

C TC = temperatura de inicio de la transformación

C T10 y T20 = efecto de los elementos aleantes en la fuerza motriz de la transformación C

SUBROUTINE FRACTION(FVA,T,D,VC,TC,T10,T20) IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z), INTEGER(I,J) DOUBLE PRECISION FUN, T10, T20, VC, D, DELX, Y, FVA DOUBLE PRECISION INT1, INT, TC

С

C Cálculo numérico de la integral de la función FUN

C Origen de integración en TC o temperatura a la cual la fuerza de la transformación

C ferrita-austenita es nula.

С

```
T=T+DELX
Y=FUN(T,TC+1,T10,T20,D,VC)
INT=INT+Y
```

10 CONTINUE

```
INT1=FUN(TC+1,TC+1,T10,T20,D,VC)+FUN(T,TC+1,T10,T20,D,VC)
INT=DELX*(INT1/2.0+INT)
FVA=1.0-DEXP(-INT)
RETURN
END
```

С

C Función FUN a integrar

C G es la velocidad de crecimiento

C FREE en la fuerza motriz de la transformación

DOUBLE PRECISION FUNCTION FUN(I,TI,T10,T20,D,VC) DOUBLE PRECISION I, T10, T20, D, VC, Z, G, N, TI,F, T7, T8 N=VC*D KS=(6.7)/(N) KE=(53.4)/(N**2) KC=(150.8)/(N**3)

С

1

C Cálculo de la fuerza motriz de la transformación

```
T7=I-100.0D+0*T20

T8=T7-1140.0D+0

IF (T7 .LT. 300) GOTO 1

IF (T7 .LT. 700) GOTO 2

IF (T7 .LT. 940) GOTO 3

F=-8.88909+0.26557*(T8)-1.04923D-3*((T8)**2)

F=F+2.70013D-6*((T8)**3)-3.58434D-9*((T8)**4)

GOTO 4

F=1.38*T7-1499
```

GOTO 4

2 F=1.65786*T7-1581

GOTO 4

3 F=1.30089*T7-1331

4 FREE=(141.0*T10 + F)

```
G1=((1.64e+17*5.0E-07*4.187*FREE)/(13.8D-24*I*6.023D+23))
```

G=G1*DEXP(-(276.3288D-21)/(13.8D-24*I))

IF (G.LT.0.0D+00) G=0.0D+00

۰.

Z=I-TI

```
FUN=(KS*G)+(KE*(G**2)*Z)+(KC*(G**3)*(Z**2))
```

RETURN

END

Apéndice C

C Programa diseñado para calcular las variaciones relativas de longitud como una

C función de la temperatura a partir del conocimiento de la evolución de las fracciones

C de volumen de las fases presentes en el calentamiento continuo de un acero

C ferrítico-perlítico

C Nomenclatura:

C FVAA = fracción de volumen de austenita

C VCE = fracción de volumen de cementita

C VF =fracción de volumen de ferrita

C C =contenido en carbono en % en peso

C SI = contenido en silicio en % en peso

C MN = contenido en manganeso en % en peso

C NI = contenido en níquel en % en peso

C CR = contenido en cromo en % en peso

C N = contenido en nitrógeno en % en peso

C AL = contenido en aluminio en % en peso

C CO = contenido en cobalto en % en peso

C CU = contenido en cobre en % en peso

C MO = contenido en molibdeno en % en peso

C NB = contenido en niobio en % en peso

C TIT = contenido en titanio en % en peso

C V = contenido en vanadio en % en peso

C W =contenido en volframio en % en peso

C S = espaciado interlaminar de la perlita

C AP = longitud de borde de intercara de colonia de perlita

C VC = velocidad de calentamiento

C P = fracción de volumen inicial de perlita

C VFI, VCI = fracciones de volumen iniciales de ferrita y cementita, respectivamente

C AC1 = temperatura de inicio de la transformación en grados centígrados

C TC= temperatura de inicio de la transformación en grados Kelvin

C AAO, AFO, ACO, BCO. CCO = parámetros de red en Å de la austenita, ferrita y

C cementita respectivamente, a temperatura ambiente

C BA, BF, BEC = coeficientes lineales de dilatación térmica de la austenita, ferrita y

C cementita, respectivamente.

C AA, AF, ACT, BC, CC = parámetros de red en Å de la austenita, ferrita y cementita

C respectivamente, a una temperatura T cualquiera

C VCALOW, VCFLOW, VCCLOW = volumen de las celdas unidad a temperatura C ambiente.

C VLOW volumen inicial de la muestra

C VCA, VCF, VCC = volumen de las celdas a una temperatura T cualquiera

C VTOT = volumen de la muestra a una temperatura T cualquiera

C FVA = fracción de volumen de austenita formada a partir de la perlita

C LEN = variación relativa de longitud a una temperatura T cualquiera

С

IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z), INTEGER(I,J) DOUBLE PRECISION FVAA(1000),VCE(1000),VF(1000) DOUBLE PRECISION C, SI, MN, NI, CR, N, AL, CO, CU, MO DOUBLE PRECISION NB, TIT, V, W, S, AP,VC, P, AC1, TC DOUBLE PRECISION AAO, AFO, ACO, BCO, CCO, BA, BF, BEC DOUBLE PRECISION AA, AF, ACT, BC, CC DOUBLE PRECISION VCALOW, VCFLOW, VCCLOW, VLOW DOUBLE PRECISION VCA, VCF, VCC, VTOT, FVA, LEN

С

OPEN(UNIT=5,FILE='indual') READ(5,*)C READ(5,*)SI READ(5,*)MN READ(5,*)NI READ(5,*)MO READ(5,*)CR READ(5,*)N READ(5,*)AL READ(5,*)CO READ(5,*)CU READ(5,*)NB READ(5,*)NB READ(5,*)V READ(5,*)P READ(5,*)S READ(5,*)AP READ(5,*)AP

С

C Cálculo de la composición del acero en fracción molar

С

FE1=C+SI+MN+NI+MO+CR+N FE2=AL+CO+CU+NB+TIT+V+W FE=100.0-FE1-FE2 AFE=FE/55.847 M1=AC+ASI+AMN+ANI+AMO+ACR+AN+AAL M2=ACO+ACU+ANB+ATIT+AV+AW+AFE M=M1+M2MC = AC/MMSI=ASI/M MMN=AMN/M MNI=ANI/M MMO=AMO/M MCR=ACR/M MNT=AN/M MAL=AAL/M MCO=ACO/M MCU=ACU/M MNB=ANB/M MTI=ATIT/M MV=AV/M MW=AW/M

С

PRINT *,'Running, wait for a minute please...' OPEN(UNIT=6,FILE='DATA') WRITE(6,1111) WRITE(6,1112)

C Microestructura inicial ferrita+perlita

MFE=AFE/M

VCI=0.12D+00*P VFI=1.0D+00-VCI AC1=723-10.7*MN-16.9*NI+29.1*SI+16.9*CR+6.38*W TC=AC1+273.0D+00 С

C Cálculo de los parámetros de red en Å de las celdas unidad a temperatura ambiente

C Austenita

AAO1=3.573+0.033*C+0.00095*MN-0.0002*NI+0.0006*CR AAO2=0.0031*MO+0.0018*V AAO=AAO1+AAO2

С

C Cementita

ACO=4.5246D+00 BCO=5.0884D+00 CCO=6.7423D+00

С

C Ferrita

AFO=2.866D+00

С

C Cálculo de los coeficientes de dilatación térmica de las celdas unidad.

```
BF=1.244D-05
BA=2.065D-05
```

С

C El coeficiente de dilatación térmica de la cementita varía con la temperatura C

į

C ILOW e IHIGH son las temperaturas inicial y final del calentamiento

C son dadas en K.

```
ILOW=300
IHIGH=1273
```

С

C Fracciones de volumen de las fases a 300K

```
FVAA(1)=0
VCE(1)=VCI
VF(1)=VFI
```

С

C Cálculo del volumen de las celdas a ILOW

AA=AAO*(1+(BA*(ILOW-300))) AF=AFO*(1+(BF*(ILOW-300))) BEC=6.0D-06+3.0D-09*(ILOW-273)+1.0D-11*(ILOW-273)**2 ACT=ACO*(1+(BEC*(ILOW-300))) BC=BCO*(1+(BEC*(ILOW-300))) CC=CCO*(1+(BEC*(ILOW-300))) VCFLOW=AF**3 VCALOW=AA**3 VCCLOW=ACT*BC*CC

С

C Cálculo del volumen de la muestra a ILOW

VLOW=2*VCFLOW*VFI+(VCCLOW/3)*VCI

1

С

C Cálculo del volumen de la muestra a cualquier temperatura

С

C Cálculo de los volúmenes de las celdas unidad

```
BEC=6.0D-06+3.0D-09*(T-273)+1.0E-11*(T-273)**2
AF=AFO*(1+(BF*(T-300)))
AA=AAO*(1+(BA*(T-300)))
ACT=ACO*(1+(BEC*(T-300)))
BC=BCO*(1+(BEC*(T-300)))
CC=CCO*(1+(BEC*(T-300)))
VCF=AF**3
VCA=AA**3
VCC=ACT*BC*CC
```

C Cálculo de los volúmenes de las fases a cualquier temperatura

IF(T .LT. TC) THEN FVAA(i)=FVAA(1)

```
VCE(i)=VCE(1)
VF(i)=VF(1)
```

ELSE

CALL FRACTION(FVA,T,S,AP,VC,TC)

С

C disolución de cementita en la perlita

VCE(i)=0.12D+00*P*(1.0D+00-FVA)

С

C transformación ferrita-austenita

VFN=5.6d+00*VC

VFD=3.0D-13*(T-TC)**5.6D+00

VFT=VFN/(VFN+VFD)

VF(i)=(VFT*(1.0D+00-P)+0.88*P*(1-FVA)

FVAA(i)=1.0D+00-VCE(i)-VF(i)

END IF

IF (T.GT.1173) THEN

FA900=FVAA(874)

VCE(i)=0.0D+00

VFN=VC**2*(1.0D+00-FA900)

VFDK=VC**2

VFD=(1.0D+00-FA900)*1.2D-03*(T-1173)**2

VFT=VFN/(VFDK+VFD)

FVAT=1.0D+00-VFT

VF(i)=VFT

FVAA(i)=FVAT

END IF

VTOT=2*VCF*VF(i) + VCA*FVAA(i) + (VCC/3)*VCE(i)

& -(VLOW)

VTOT=VTOT/(VLOW)

С

C Cálculo de la variación relativa de longitud

LEN=(VTOT)/3.0D+00

	WRITE(6,31)T-273,LEN,VF(i),VCE(i),FVAA(i)	1 1
С		
1	CONTINUE	
	CLOSE(6)	
31	FORMAT(5X,F5.0,5X,F10.6,5X,E14.5,5X,E14.5,5X,E14.5)	
1111	FORMAT('Centigrade',8x,'Strain',11x,'Ferrite',11x,'Pearlite',	
ė	&11x, 'Austenite')	
1112 H	FORMAT('	······,
ł	&'~~~~~')	
	STOP	
	END	
С		
C****	***************	******
С		1
C Sub	rutina que calcula la fracción de volumen de austenita formada	en el
C cale	ntamiento continuo a partir del conocimiento de cinética de nuc	leación y de
C crec	imiento de la austenita dentro de la perlita mediante la integraci	ión de la ecuaci
C de A	vrami de orden cuatro	
C Non	nenclatura:	
CS =	espaciado interlaminar de la perlita	
C AP :	= longitud de borde de intercara de colonia de perlita	1
C TC :	= temperatura de inicio de la transformación en K	,
C VC	= velocidad de calentamiento	1
C FVA	A = fracción de volumen de austenita formada	1
C		н
C	SUBROUTINE FRACTION(FVA.T.S.AP.VC.TC)	
	$\mathbf{MPLICIT REAL} * 8(\mathbf{A} - \mathbf{H}, \mathbf{K} - 7) \mathbf{NTEGER}(\mathbf{I}, \mathbf{J})$	
	DOUBLE PRECISION S AP VC TC T DELX. Y	
	DOUBLE PRECISION FNT TO1 FNT1 F FVA	
C	DOUDLE ERECIDIOIN EIVI, 101, EIVI1, 1, 1, 1 VIL	
U		

C Cálculo numérico de la integral de la función F

-

J=1000

DELX=(T-TC)/REAL(J) T=TC ENT=0.0 DO 10 I=1, J-1 T=T+DELX Y=F(T,TC,S,AP,VC)

ENT=ENT+Y

10

CONTINUE TC1=TC+1.0D+00 ENT1=F(TC1,TC,S,AP,VC)+F(T,TC,S,AP,VC) ENT=DELX*(ENT1/2.0+ENT) FVA=1.0D+00-DEXP(-ENT) RETURN END

С

C Función F a integrar

C N es la velocidad de nucleación

C G es la velocidad de crecimiento

DOUBLE PRECISION FUNCTION F(TT,TI,S,AP,VC) DOUBLE PRECISION S, AP, VC, PI, K, Z, N1, N2, N, G DOUBLE PRECISION COM, TI, TT

С

PI=3.1416D+00 K=(4*PI)/(3*(VC**4)) Z=TT-TI N1=S*AP*AP N2=(0.3514*VC)-(0.1384*DLOG(1.00D+00/N1))+4.1414 N=((1.0D-11)/(N1**(N2)))*DEXP(-25.38D+00/Z) IF (VC .GT. 0.5D+00) THEN G=((1.0D-10)/(S**1))*DEXP(-29.7D+00/Z) ELSE G=((1.0D-10)/(S**2))*DEXP(-29.7D+00/Z) ENDIF COM=N*(G**3)*(Z**3) F=K*COM RETURN END

;