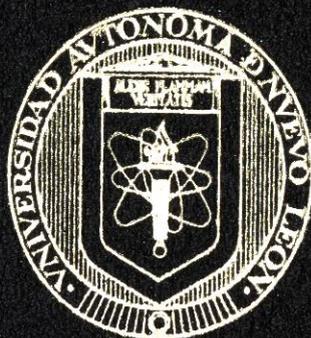


UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA

ESCUELA DE GRADUADOS



**MODELACION DE LA TRANSFORMACION DE AUSTENITA A
FERRITA EN ACEROS DE BAJO CARBONO**

TESIS

QUE PRESENTA

JULIO CESAR MORALES CHAVELA

EN OPCION AL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS

DE LA INGENIERIA MECANICA CON

ESPECIALIDAD EN MATERIALES

MONTERREY, N. L. FEBRERO DE 1992

TM

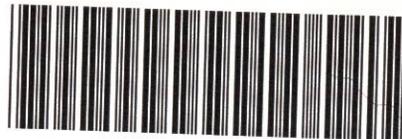
Z5853

.M2

FIME

1992

M67



1020070634

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA

ESCUELA DE GRADUADOS



**MODELACION DE LA TRANSFORMACION DE AUSTENITA A
FERRITA EN ACEROS DE BAJO CARBONO**

TESIS

QUE PRESENTA

JULIO CESAR MORALES CHAVELA

EN OPCION AL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS

DE LA INGENIERIA MECANICA CON

ESPECIALIDAD EN MATERIALES

MONTERREY, N. L. FEBRERO DE 1992

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA
ESCUELA DE GRADUADOS

DR. MOYSA LEDUC LEBANA

DR. RAFAEL COLAS ORTIZ

MODELACION DE LA TRANSFORMACION DE AUSTENITA A

ASESOR

ASESOR

FERRITA EN ACEROS DE BAJO CARBONO

DR. SALVADOR V. TESIS GALLARDO

QUE PRESENTA

JULIO CESAR MORALES CHAVELA

EN OPCION AL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA
MECANICA CON ESPECIALIDAD EN MATERIALES

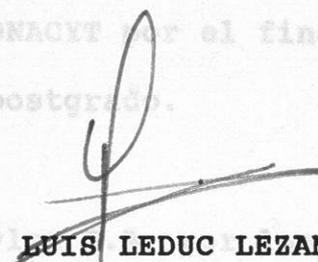
MONTERREY, N.L.

FEBRERO DE 1992

AGRADECIMIENTOS

A la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

A CONACYT por el financiamiento de mis estudios de postgrado.


DR. LUIS LEDUC LEZAMA

ASESOR


DR. RAFAEL COLAS ORTIZ

ASESOR

A mis asesores, por dirigir este trabajo y motivarme a dar siempre más.

Al Lic. Raúl Rodríguez Miñiga, por el material bibliográfico facilitado para la maestría.


DR. SALVADOR VALTIERRA GALLARDO

REVISOR

A mis amigos y compañeros.

AGRADECIMIENTOS

A la Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica.

A CONACYT por el financiamiento de mis estudios de postgrado.

A Hylsa S.A. por las facilidades brindadas para la realización de este trabajo.

A mis asesores, por dirigir este trabajo y motivarme a dar siempre más.

Al Lic. Raúl Rodríguez Miranda, por el material bibliográfico facilitado durante la maestría.

A mis profesores.

A mis amigos y compañeros.

INDICE

Pag.

INTRODUCCION

1. OBJETIVO Y JUSTIFICACION

2. MARCO TEORICO

2.1. CONCEPTOS BASICOS

2.2. METODOLOGIA

2.3. REVISION DE LA LITERATURA

2.4. HIPOTESIS

2.5. DISEÑO EXPERIMENTAL

2.6. PROCEDIMIENTO

2.7. RESULTADOS

2.8. CONCLUSIONES

2.9. RECOMENDACIONES

2.10. BIBLIOGRAFIA

2.11. ANEXOS

2.12. GLOSARIO

2.13. INDICE ALFABETICO

2.14. INDICE NUMERICO

2.15. INDICE DE FIGURAS

2.16. INDICE DE TABLAS

2.17. INDICE DE REFERENCIAS

2.18. INDICE DE CITAS

2.19. INDICE DE ABREVIATURAS

2.20. INDICE DE SIGLAS

A mi familia

I N D I C E.

	Pag.
RESUMEN.	8
 CAPITULO 1. INTRODUCCION.	 9
 CAPITULO 2. CINETICA DE LA TRANSFORMACION	
AUSTENITA - FERRITA.	
2.1.- Introducción.	12
2.2.- Cambio de energía libre durante la transformación.	12
2.3.- Velocidad de nucleación.	15
2.3.1.- Sitios posibles de nucleación.	17
2.4.- Velocidad de crecimiento.	18
2.4.1.- Velocidad de crecimiento normal a la frontera de grano.	18
2.4.2.- Velocidad de crecimiento a lo largo de la frontera de grano.	20
2.4.3.- Mediciones experimentales de la cinética de crecimiento.	20
2.5.- Fracción transformada.	21
2.6.- Cinética de transformación a enfriamiento continuo.	22
2.6.1.- Radio de la ferrita a enfriamiento continuo.	25
2.7.- Modelos que predicen el tamaño de grano ferrítico formado isotérmicamente.	25
2.7.1.- Modelo para austenita recristalizada.	26
2.7.2.- Modelo para austenita deformada.	28

2.8.- Relaciones experimentales que predicen el tamaño de grano ferrítico en enfriamiento continuo.	30
2.9.- Datos de variables requeridas en el modelo y disponibles en la literatura.	33

CAPITULO 3. MODELO PROPUESTO PARA LA TRANSFORMACION DE AUSTENITA A FERRITA EN ACEROS DE BAJO CARBONO.

3.1.- Introducción.	35
3.2.- Velocidad de nucleación.	36
3.2.1.- Nucleación en esquinas de grano.	39
3.2.2.- Nucleación en bordes de grano.	42
3.3.- Velocidad de crecimiento.	44
3.4.- Consumo de los sitios posibles de nucleación.	44
3.4.1.- Fracción transformada.	47
3.5.- Cantidad de granos nucleados isotérmicamente.	50
3.5.1.- Cantidad de granos nucleados a enfriamiento continuo.	51
3.6.- Radio promedio de la ferrita a enfriamiento continuo.	52
3.7.- Metodología para la reproducción de la zona ferrítica de un diagrama de transformación isotérmica.	53
3.7.1.- Cálculo de la energía de activación.	53
3.7.2.- Altura del núcleo crítico.	55
3.7.3.- Distribución de ángulos utilizados.	57
3.7.3.1.- Distribución de esquinas.	57

3.7.3.2.- Distribución de bordes.	58
3.7.4.- Sitios posibles de nucleación.	59
3.7.5.- Cálculo del tamaño de grano ferrítico y comparación con relaciones experimentales.	62
3.7.5.1.- Generalización del modelo.	63
3.8.- Procedimiento para reproducir un TTT y calcular el tamaño de grano ferrítico a enfriamiento continuo de un acero de bajo carbono y tamaño de grano austenítico entre 3 y 9 ASTM.	69

CAPITULO 4. DISCUSION.

4.1- Introducción.	71
4.2.- Consideraciones del modelo.	71
4.2.1.- Núcleos de superficie.	71
4.2.2.- Distribución de esquinas.	72
4.2.3.- Distribución de bordes.	73
4.2.4.- Tamaño de grano ferrítico.	74
4.2.5.- Enfriamiento continuo.	74
4.3.- Comparación con datos experimentales.	75
4.3.1.- Angulo dihedral θ .	75
4.3.2.- Relación largo-ancho de los precipitados.	75
4.3.3.- Tamaño de grano ferrítico.	76
4.3.4.- Cinética de transformación.	77
4.3.5.- Saturación de los sitios posibles de nucleación.	80
4.4.- Restricciones del modelo.	82

CAPITULO 5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

5.1.- Introducción.	84
5.2.- Conclusiones.	84
5.3.- Recomendaciones.	86

REFERENCIAS.	87
---------------------	-----------

APENDICES.	92
-------------------	-----------

FIGURAS.	127
-----------------	------------

RESUMEN

Se revisaron las relaciones existentes en la literatura para predecir la cinética de transformación de austenita a ferrita, junto con los modelos que predicen el tamaño de grano ferrítico final en condiciones de transformación isotérmica y durante el enfriamiento continuo.

Se desarrolló un modelo para calcular el tamaño de grano ferrítico final para el enfriamiento continuo. Apartir de la reproducción de la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica se determinó la dependencia de las velocidades de nucleación y crecimiento en función de la composición química del acero, el tamaño de grano austenítico y la temperatura. Se consideraron como sitios posibles de nucleación a las distribuciones de ángulos de esquinas y bordes, los núcleos en la superficie fueron considerados como embriones de borde con un ángulo muy grande. De esta manera cada sitio de nucleación se activó en el intervalo de temperatura observado experimentalmente y trajo consigo que, en los núcleos de superficie, existiese una razón de longitud a ancho de aproximadamente 3:1, misma que ha sido reportada en la literatura.

Se comparan las predicciones del modelo con algunas relaciones experimentales encontradas en la literatura, encontrándose buena concordancia.

CAPITULO 1.

INTRODUCCION.

Las propiedades de un producto de acero, así como su proceso de elaboración, han sido relacionados por medio de técnicas estadísticas. Estas consisten en fórmulas que, basándose en la composición química del acero y los parámetros del proceso, predicen las propiedades mecánicas de los productos finales sin considerar la evolución microestructural durante el proceso.

La demanda de propiedades mecánicas óptimas ha hecho que se realicen intentos por construir modelos que establezcan relaciones exactas entre la microestructura del producto y los parámetros del proceso; de tal manera que se puedan modificar las condiciones de operación para obtener la microestructura asociada a las propiedades mecánicas deseadas en el producto.

Las propiedades mecánicas en los aceros de bajo carbono se deben principalmente al tamaño de grano ferrítico Fig. 1, que depende de los siguientes factores: composición química, tamaño de grano austenítico, deformación y velocidad de enfriamiento [1,3,5].

El principio básico para el cálculo del tamaño de grano ferrítico en este modelo está basado en los procesos de nucleación y crecimiento. Se considera que a un cierto subenfriamiento se nuclearán una cierta cantidad de granos en aquellos sitios en los

cuales la energía de activación sea mínima, de tal forma que a un subenfriamiento mayor serán nucleados otra cierta cantidad de granos, pero los generados en primer término habrán crecido. Entonces, si sabemos a que temperatura y tiempo se nuclea cada grano, podremos saber cual es su dimensión final y obtendremos así un tamaño de grano ferrítico promedio.

En el esquema de la Fig. 2, se muestra que la austenita tiene asociada una energía libre G_1 y la ferrita otra energía libre G_2 . Para que la austenita pueda transformarse a ferrita tiene que vencer una cierta energía de activación (ΔG^*). A pequeños subenfriamientos, la fuerza motriz de la transformación (ΔG_v) será pequeña y sólo podrá vencer la barrera de energía que presentan las esquinas de los granos; en tanto que a mayores subenfriamientos la fuerza motriz de la transformación será mayor y podrá reducir las barreras que presentan las esquinas y bordes. Así mientras aumente el subenfriamiento esta fuerza motriz será capaz de reducir las barreras de energía que presenten los distintos sitios posibles de nucleación.

En la Fig. 3 se pueden apreciar los tres distintos sitios posibles de nucleación heterogénea en un grano austenítico: esquinas, bordes y superficie.

El procedimiento a seguir para la construcción del modelo consiste en seleccionar los sitios posibles de nucleación, las

formas de los núcleos críticos, la velocidad de nucleación en función de las características del acero y determinar la velocidad de crecimiento para los mismos. Si se puede reproducir la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica (TTT) con las condiciones seleccionadas, entonces se podrán considerar como válidas, y se podrán utilizar para calcular el tamaño de grano ferrítico final.

CAPITULO 2.

CINETICA DE LA TRANSFORMACION AUSTENITA - FERRITA.

2.1.- INTRODUCCION.

Es bien conocido que la formación de ferrita proeutectoide desde austenita se lleva a cabo por una reacción de nucleación y crecimiento, en la que la ferrita se genera de manera heterogénea sobre los defectos cristalinos que existen en la austenita en el punto de transformación. Es también conocido que el refinamiento de la microestructura puede ser obtenido através de la transformación procurando que la razón de velocidades de nucleación (\dot{N}) y crecimiento (\dot{G}) sea grande. Es obvio entonces, que el control del tamaño de grano durante la transformación debe incluir consideraciones de \dot{N} y \dot{G} y su dependencia con la temperatura, composición química, tamaño de grano austenítico y cantidad de deformación.

2.2.- CAMBIO DE ENERGIA LIBRE DURANTE LA TRANSFORMACION.

El cambio de energía libre en la precipitación de ferrita (α) desde austenita (γ) en la frontera de grano, está dada por Shewmon [1] como:

$$\Delta G(d) = ad^3(\Delta G_v + \Delta G_e) + bd^2\sigma_{\alpha\gamma} - cd^2\sigma_{\gamma\gamma} \quad (2.1)$$

donde d es la dimensión más grande del precipitado, a , b y c son constantes las cuales dependen de la razón $\sigma_{\gamma\gamma}/\sigma_{\alpha\gamma}$, ΔG_v es el cambio de energía libre por unidad de volumen, ΔG_e es la energía de

deformación por unidad de volumen, y $\sigma_{\gamma\gamma}$ y $\sigma_{\alpha\gamma}$ son las energías interfaciales entre la matriz y entre la matriz y el precipitado respectivamente.

El valor de ΔG calculado con la ecuación 2.1 decrece cuando $\sigma_{\gamma\gamma}$ se incrementa y dado que está es la fuerza impulsora para la precipitación, entonces la velocidad de nucleación se incrementará con $\sigma_{\gamma\gamma}$.

El cambio de energía libre por unidad de volumen (ΔG_V), para la transformación austenita-ferrita puede ser calculado por distintos métodos termodinámicos, el más completo de todos ellos es el de soluciones regulares propuesto por Hillert y Staffanson [2], en donde la contribución de cada elemento de aleación es tomada en cuenta con su potencial químico. Una manera muy simple de estimar el cambio de energía libre por unidad de volumen es dado por [1,3]:

$$\Delta G_V = \frac{L \Delta T}{T_{Ae3}} \quad (2.2)$$

donde L es el calor latente de transformación, ΔT es el subenfriamiento, y T_{Ae3} es la temperatura de transformación en equilibrio; en la ecuación anterior, la composición química del acero se toma en cuenta por medio del calor latente de transformación.

La energía de deformación (ΔG_e) se produce cuando el volumen transformado no enbana perfectamente bien dentro del espacio ocupado originalmente por la matriz. ΔG_e es proporcional al volumen del precipitado, ya sea coherente o incoherente [3].

El valor de $\sigma_{\alpha\gamma}$ puede variar grandemente desde valores muy bajos para interfases coherentes hasta valores altos en interfases incoherentes [3]. Entonces el termino de la ecuación 2.1 que incluye $\sigma_{\alpha\gamma}$ puede ser remplazado por $\sum A_i \sigma_{\alpha\gamma i}$ que es la sumatoria sobre todas la superficies del núcleo.

Roberts, Lidefelt y Sandberg [4] comentan que para aceros microaleados la fuerza motriz para la transformación (ΔG_v) es muy pequeña debido a que la composición de ambas fases yace a la izquierda de el diagrama Fe-C. Entonces se puede esperar que únicamente algunos sitios se activen durante la transformación. Los pequeños valores de ΔG_v implican que a bajos subenfriamientos sólo las esquinas y bordes de grano se activan como sitios de nucleación durante la transformación y, dado que el número de tales sitios es limitado, su contribución a la velocidad de nucleación en volumen, y a la velocidad de transformación, es pequeña, a menos que el tamaño de grano sea muy chico.

Cahn [5] mostró que la energía de activación (ΔG^*) para la nucleación heterogénea sobre la frontera de grano puede ser expresada como

(2.3)

$$\Delta G^*(het) = \Delta G^*(homo) \cdot \frac{2-3S+S^2}{4}$$

donde S es el coseno del ángulo definido por $\cos(\theta) = \sigma_{\gamma\gamma}/2\sigma_{\alpha\gamma}$. La Fig. 4 muestra la relación entre $\Delta G^*(het)/\Delta G^*(homo)$ y el $\cos(\theta)$. Cahn indica que la naturaleza del sitio de la frontera de grano es muy importante y muestra como $\Delta G^*(het)$ puede ser reducida fuertemente incrementando la velocidad de nucleación, por la naturaleza de estos sitios.

2.3.- VELOCIDAD DE NUCLEACION.

La velocidad de nucleación es estimada como la probabilidad de que un átomo salte a un núcleo de tamaño crítico de tal manera que al sumársele se convierta en un núcleo estable [3]. En la teoría clásica de nucleación se desarrolló la expresión general para la velocidad de nucleación, en donde aparecen factores probabilísticos [6].

La velocidad de nucleación desarrollada por la teoría clásica [6] expresa su dependencia con el tiempo y la temperatura como;

$$J^* = Z\beta^*N \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{t}\right) \quad (2.4a)$$

donde N es la densidad de sitios atómicos disponibles para la nucleación, Z es el factor Zeldovich de no equilibrio, el cual corrige la velocidad de nucleación tomando en cuenta los núcleos

que se disuelven y los que crecen más allá del tamaño crítico, β^* es la velocidad a la cual los átomos se suman al núcleo crítico, ΔG^* es la energía de activación para la formación de un núcleo crítico, τ es el tiempo de incubación y t es el tiempo de reacción isotérmica.

Fine [7] mostró que la velocidad de nucleación resultante desde una distribución de sitios de nucleación puede ser expresada como:

$$\dot{N} = \sum_{j=1}^n \frac{N_j K}{V} \exp\left(-\frac{\Delta G^*_j + Q}{RT}\right) \quad (2.4b)$$

donde j se refiere al sitio particular de nucleación, N_j/V es el número de sitios para la nucleación por unidad de volumen, ΔG^*_j es la energía de activación para este tipo de sitio, Q es la energía de activación para la autodifusión y K es una constante que involucra la frecuencia de salto de los átomos y el número de átomos en la superficie del embrión.

La dependencia de \dot{N} con la temperatura predice una curva C en su comportamiento. Cuando ΔT se aproxima a cero, ΔG^* se aproxima a infinito ($\Delta G^* \propto 1/\Delta T^2$) y por tanto \dot{N} se aproxima a cero. Cuando ΔT es muy grande y T muy baja, entonces ΔG^* se aproxima a cero y \dot{N} se aproxima al nivel gobernado por $\exp(-Q/RT)$. Si T es baja el valor de $\exp(-Q/RT)$ es pequeño y \dot{N} es pequeña. Entonces aunque \dot{N} es pequeña a muy pequeños y grandes ΔT , existe un valor máximo

a valores intermedios de ΔT .

Cahn [5] supuso que la nucleación se presenta en un material policristalino con frecuencias características en cuatro tipos de sitios. Las designó como: frecuencia de nucleación homogénea por unidad de volumen I_v , frecuencia de nucleación en la superficie de grano por unidad de área I_s , frecuencia de nucleación en borde por unidad de longitud I_e , y frecuencia de nucleación en esquina por esquina I_c . Las frecuencias de nucleación por unidad de volumen para cada tipo de sitio se obtienen como $\dot{N}_v = I_v$, $\dot{N}_s = S_v I_s$, $\dot{N}_e = L_v I_e$, y $\dot{N}_c = C_v I_c$, donde S_v , L_v y C_v son respectivamente el área de la superficie, la longitud de borde, y el número de esquinas, todas por unidad de volumen. La velocidad de nucleación total será

$$\dot{N} = \dot{N}_v + \dot{N}_s + \dot{N}_e + \dot{N}_c.$$

2.3.1.- SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

Los sitios posibles de nucleación son las vacancias que se encuentran cerca de una esquina, de un borde, de la superficie o en el volumen de un grano. Esto es por que la reacción de transformación comenzará siempre con el salto de un átomo [7], al cual se le irán sumando otros hasta alcanzar el tamaño crítico en los lugares antes mencionados, o disolverse.

Debido a que las vacancias son un defecto cristalino de equilibrio, la fracción de vacancias que corresponden a una condición de mínima energía libre esta dada por [8],

$$n_{v.eq.} = n_{s.a.t.} \exp\left(-\frac{U_v}{kT}\right) \quad (2.5)$$

donde $n_{s.a.t.}$ son el número total de sitios atómicos; $n_{v.eq.}$ son las vacancias en equilibrio a la temperatura T ; U_v es la energía de activación para una vacancia, con un valor típico de 1.1×10^{-18} Joules [8]. Tenemos de esta manera que, para una temperatura de 1250°K , la fracción de sitios vacantes será $n_{v.eq.}/n_{s.a.t.} \cong 10^{-3}$, y para una temperatura de 300°K $n_{v.eq.}/n_{s.a.t.} \cong 10^{-12}$. Lo anterior significa que la velocidad a la cual las vacancias se mueven en la red, decrece exponencialmente con la disminución de temperatura, y consecuentemente en muchos metales es posible retener concentraciones de vacancias de alta temperatura por un enfriamiento rápido.

2.4.- VELOCIDAD DE CRECIMIENTO.

Un precipitado en la frontera de grano puede crecer a lo largo de la frontera austenítica o en forma normal a ella. Se puede suponer que la difusión controla el crecimiento, dado que el precipitado puede ser rodeado por interfases incoherentes [3].

2.4.1.- VELOCIDAD DE CRECIMIENTO NORMAL A LA FRONTERA DE GRANO.

El modelo difusional desarrollado por Zener [9], predice una velocidad de crecimiento parabólica en la dirección normal de la frontera de grano, dada por:

$$S = \alpha t^{1/2} \quad (2.6)$$

donde S es la mitad del grosor del precipitado, t es el tiempo de crecimiento, y α es la constante parabólica dada como

$$\alpha = \frac{(C_\gamma - C_0)}{(C_\gamma - C_\alpha)^{1/2} (C_0 - C_\alpha)^{1/2}} D^{1/2} \quad (2.7)$$

donde C_0 es la composición de carbono original de la matriz, C_γ es la composición de γ en equilibrio con α , C_α es la composición de α en equilibrio con γ , y D es el coeficiente de difusión para el carbono en γ .

La dependencia de α (Ec. 2.7) con la temperatura predice una curva C en su comportamiento, como fué también comentado para la velocidad de nucleación. De los cuatro factores que componen α , únicamente dos contribuyen en mayor proporción a la dependencia con la temperatura. El primero es $C_\gamma - C_0$ el cual es controlado por la pendiente Ae_3 , en tanto que el segundo es el coeficiente de difusión. El primer factor se incrementa al decrecer la temperatura, en tanto que el coeficiente de difusión disminuye. De aquí surge el comportamiento en forma de una curva C con la temperatura.

El crecimiento de los precipitados se detendrá cuando los campos de difusión de estos se traslapen, pero la velocidad de

crecimiento se puede considerar constante hasta casi el final de la transformación.

2.4.2.- VELOCIDAD DE CRECIMIENTO A LO LARGO DE LA FRONTERA DE GRANO.

La cinética de crecimiento longitudinal también ha sido considerada controlada por difusión. Hillert [10] muestra que la velocidad longitudinal G_1 , esta dada por

$$G_1 = \frac{(C_\gamma - C_0)}{4r^1(C_0 - C_\alpha)} \text{Sen}\phi D \quad (2.8)$$

donde C_0 , C_γ , C_α y D son definidas como en la Ec. 2.7, ϕ es el complemento del ángulo dihedral θ , y r^1 es el radio de curvatura del precipitado en el área adyacente a la unión con la frontera.

2.4.3.- MEDICIONES EXPERIMENTALES DE LA CINÉTICA DE CRECIMIENTO.

Bradley, Rigsbee y Aaronson [11] observaron que la razón de ancho a largo de precipitados de ferrita proeutectoide, en la superficie de grano, era de 0.33, independientemente del tiempo de la reacción, temperatura y contenido de carbono. Además, la medición del ángulo dihedral θ que obtuvieron fué de 50 grados, el cual es más pequeño al que se esperaba, debido a que las mediciones de energías interfaciales relativas hechas por Gjostein [12] en aleaciones Fe-C indicaban un ángulo dihedral promedio de 57.5 grados en un precipitado de ferrita en equilibrio con la matriz de

austenita.

Suponiendo que la forma del precipitado sea la unión de dos casquetes esféricos, al ángulo predicho por Gjostein le correspondería una razón de ancho a largo de 0.55, que es un valor significativamente más grande que el observado experimentalmente de 0.33, pero al ángulo observado le correspondería una razón de 0.47.

La conclusión a la que llegan estos investigadores es que se mantiene un ángulo dihedral de no equilibrio durante el crecimiento del precipitado.

2.5.- FRACCION TRANSFORMADA.

Cuando los granos se nuclean y crecen pueden chocar unos con otros, y entonces el crecimiento a lo largo del área de contacto se detiene y la velocidad de nucleación decrece. Avrami [13], y Johnson y Mehl [14] utilizaron un artificio para calcular la fracción de material transformado, llamado fracción de volumen extendido X_e . Este es la suma de los volúmenes de todos los granos nucleados dividido por el volumen total. Suponiendo que los granos nunca paran de crecer y que los nuevos granos se nuclean a la misma velocidad, entonces X_e puede exceder la unidad. Si la nucleación es distribuida aleatoriamente, entonces la fracción de volumen X está dada por

$$X=1-\exp(-X_e)$$

(2.9)

Cahn [5] extendió este concepto y definió una fracción de área y de línea transformada.

2.6- CINÉTICA DE TRANSFORMACION A ENFRIAMIENTO CONTINUO.

El estudio teórico de la transformación a enfriamiento continuo fue comenzado por Scheil [15], quien trató de predecir la temperatura del inicio de la transformación desde el periodo de incubación de la transformación isotérmica. Scheil supuso que los periodos de incubación isotérmicos que preceden a la transformación son aditivos, y propuso que el inicio de la transformación en enfriamiento continuo comenzará cuando la suma de las fracciones de los periodos de incubación isotérmicos sean igual a la unidad, es decir

$$\sum \frac{t}{\tau} = 1 \quad (2.10)$$

donde τ es el periodo de incubación a una temperatura dada y t es el tiempo que estuvo el material a esa temperatura.

La regla de aditividad de Scheil ha sido aplicada únicamente para la iniciación de la reacción y se ha mostrado [16] que es válida experimentalmente para la incubación de perlita, ferrita proeutectoide y carburos proeutectoides, dentro de intervalos

restringidos de temperatura.

La cinética de transformación a enfriamiento continuo es estudiada en base de transformaciones isotérmicas, porque en este tipo de transformación la temperatura se mantiene constante y se pueden tratar en forma teórica a las velocidades de nucleación y crecimiento.

Una transformación a enfriamiento continuo puede ser considerada como la suma de pequeños intervalos de tiempo isotérmicos en temperaturas sucesivas.

Avrami [17] mostró que para el intervalo isocinético, aquel en el que la velocidad de nucleación es proporcional a la velocidad de crecimiento sobre un intervalo de temperatura, la reacción es aditiva. Cahn [18] comenta que la isocinética es una condición muy especial y no se puede esperar que se presente en muchos sistemas, entonces propone que la reacción sea aditiva cuando la velocidad de transformación es únicamente una función de la cantidad transformada y la temperatura.

Whittaker [19] utilizó un artificio para conocer el tiempo de recristalización a temperatura constante cuando el proceso es llevado a cabo en enfriamiento continuo. Definió un tiempo compensado por temperatura para la recristalización como:

$$W = t \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2.11)$$

y para enfriamiento continuo:

$$W = \sum_0^t \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \delta t \quad (2.12)$$

entonces el valor de W puede ser convertido a su tiempo equivalente a temperatura constante por medio de la Ec. 2.11, aquí Q es la energía de activación de la recristalización.

Whittaker manejó la idea de que la rapidez de la transformación disminuye con la temperatura (lo anterior es válido para recristalización), y entonces el tiempo para la transformación a una temperatura alta, que es pequeño, se transformará en un tiempo más grande para una temperatura baja.

Esta misma idea de Whittaker se puede utilizar para hacer una extensión de lo que propuso Scheil, esto es, la aditividad de las fracciones de periodos isotérmicos sólo se puede llevar a cabo en los inicios de la transformación por que la velocidad de nucleación se mantiene constante, pero tan pronto los sitios se vayan consumiendo, la nucleación disminuirá y el tiempo para que transforme una cierta cantidad de material será mayor que en los inicios de la transformación, por lo que no habrá una aditividad lineal de las fracciones de tiempo isotérmicos; más sin embargo, se puede manejar

la aditividad con fracciones de tiempo equivalentes. Sería un tiempo compensado por temperatura y por fracción transformada, que es justamente la regla que propone Cahn [18] para la aditividad.

2.6.1.- RADIO DE LA FERRITA A ENFRIAMIENTO CONTINUO.

Umemoto [20] demostró que el cuadrado del radio de la ferrita nucleada a la temperatura T_1 y determinada a la temperatura T_n , puede ser expresada como:

$$R^2(T_n, T_1) = \sum_{i=1}^n \alpha^2(T_i) t_i \quad (2.13)$$

donde α es la constante dada por la Ec. 2.7 y t_i es el tiempo mantenido el material a la temperatura T_i .

2.7.- MODELOS QUE PREDICEN EL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO FORMADO ISOTERMICAMENTE.

El tamaño de grano ferrítico formado isotérmicamente desde austenita recristalizada y deformada ha sido estudiado experimental y teóricamente.

En general, la temperatura de transformación influye en el modo de nucleación, en la morfología y en la microestructura final de la fase precipitada [21,22].

2.7.1- MODELO PARA AUSTENITA RECRISTALIZADA.

El diámetro del grano de ferrita D_α puede ser expresado con el número total de granos nucleados a través de la transformación por unidad de volumen, n_v , como [23]

$$D_\alpha = \left(\frac{2}{3n_v} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.14)$$

Umemoto y Zing Hai Guo [24] consideran que el problema de obtener la expresión para el tamaño de grano ferrítico es equivalente a expresar n_v . Entonces consideran tres tipos de sitios de nucleación: homogénea, superficies y bordes de grano. Encuentran ecuaciones para el tamaño de grano ferrítico y para la razón de tamaños de granos de austenita y ferrita (D_γ y D_α); de tal forma que para nucleación homogénea, obtienen:

$$D_\alpha = 0.974 \left(\frac{\sqrt{I_h}}{\alpha} \right)^{-\frac{2}{5}} \quad (2.15a)$$

$$\frac{D_\gamma}{D_\alpha} = 1.027 \left(\frac{\sqrt{I_h}}{\alpha} \right)^{\frac{2}{5}} D_\gamma \quad (2.15b)$$

para superficies de grano:

$$D_{\alpha} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{-\frac{1}{6}} \left(\frac{\sqrt{I_s}}{\alpha}\right)^{-\frac{1}{3}} D_{\gamma}^{\frac{1}{3}} \quad (2.16a)$$

$$\frac{D_{\gamma}}{D_{\alpha}} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{\sqrt{I_s}}{\alpha}\right)^{\frac{1}{3}} D_{\gamma}^{\frac{2}{3}} \quad (2.16b)$$

y para bordes de grano:

$$D_{\alpha} = 0.784 \left(\frac{\sqrt{I_e}}{\alpha}\right)^{-\frac{2}{9}} D_{\gamma}^{\frac{2}{3}} \quad (2.17a)$$

$$\frac{D_{\gamma}}{D_{\alpha}} = 1.275 \left(\frac{\sqrt{I_e}}{\alpha}\right)^{\frac{2}{9}} D_{\gamma}^{\frac{1}{3}} \quad (2.17b)$$

donde I_h , I_s y I_e son las velocidades de nucleación homogénea por unidad de volumen, en la frontera de grano por unidad de área y en el borde de grano por unidad de longitud, α es la constante de crecimiento parabólica dada por la Ec. 2.7.

Umemoto y Zing Hai Guo encontraron experimentalmente que la razón D_{γ}/D_{α} en un acero Fe-0.15C fue proporcional a $D_{\gamma}^{0.42}$, $D_{\gamma}^{0.53}$ y $D_{\gamma}^{0.7}$ cuando las temperaturas de transformación fueron 700, 680 y 660 °C. Concluyendo entonces que los sitios dominantes de nucleación fueron superficies de grano y bordes, cuando la transformación ocurrió a 700 °C, y sólo superficies de grano cuando la transfor-

mación fué a 660 °C.

Lange [25] utilizó la velocidad de nucleación dada por la Ec. 2.4a, en su estado estacionario ($t \gg \tau$), y datos experimentales, para demostrar que los núcleos tienen que tener una forma de cajas rectangulares (pillbox), con una altura aproximada a tres veces el tamaño de un átomo de hierro e interfases austenita-ferrita ($\sigma_{\alpha\gamma}$) de baja energía.

2.7.2- MODELO PARA AUSTENITA DEFORMADA.

La deformación de la austenita acelera en forma substancial la nucleación de ferrita en las fronteras de grano y dentro de los granos. Los distintos tipos de sitios de nucleación observados en una muestra deformada [26] son:

- a) Fronteras de grano.
- b) Maclas de recocido.
- c) Intergranularmente.
- e) Bandas de deformación.

Roberts, Liddefelt y Sandberg [4] proponen que la austenita deformada puede presentar serraciones en su frontera de grano y la nucleación en éstas puede tener asociada una energía de activación que correspondería a esquinas y bordes. Entonces, la superficie de grano presentará una densidad de sitios posibles para nucleación muy grande y la contribución a la velocidad de nucleación en volumen será apreciable. Debido a está misma serración los núcleos

de ferrita se podrán presentar en bultos o racimos sobre la superficie de grano. De esta forma, para un dado grado de subenfriamiento, la transformación se puede acelerar al incrementar la deformación.

Umemoto, Ohtsuka y Tamura [27] basados en la idea de que la superficie de grano austenítico al ser deformada presenta serraciones o escalones, calcularon la longitud de escalones producidos y estimaron el número de granos nucleados en ellos. De esta forma, el número de granos en la superficie está dado por:

$$n_{g.b} = \int_0^{\infty} 2S_{g.b}(p) (I_{g.b}^0 + L(p) I_{g.b}^1) (1 - Y_{g.b}) dt \quad (2.18a)$$

cuando los granos nuclean en escalones producidos en maclas de recocido:

$$n_{a.t} = \int_0^{\infty} 2S_{a.t}(p) L(p) I_{a.t}^1 (1 - Y_{a.t}) dt \quad (2.18b)$$

y en dislocaciones:

$$n_f = \int_0^{\infty} \rho(p) I_d (1 - X_t) dt \quad (2.18c)$$

GRANO FERRÍTICO EN ENFRIAMIENTO CONTINUO

Existen en la literatura una gran cantidad de datos donde p es la reducción de laminación, $S_{g.b}(p)$ es la superficie de grano austenítico por unidad de volumen, $I_{g.b}^0$ es la velocidad de nucleación por unidad de área de austenita no deformada, $L(p)$ es la longitud de escalones que fueron producidos por deformación, por

unidad de área de austenita y de maclas de recocido, $I_{g.b}^1$ es la velocidad de nucleación por unidad de longitud de escalones sobre la superficie de grano, $S_{a.t}(p)$ es el área de las maclas de recocido por unidad de volumen, $I_{a.t}^1$ es la velocidad de nucleación por unidad de longitud de escalones sobre las fronteras de las maclas de recocido, $Y_{g.b}$ es la fracción de área transformada en la frontera de grano, $Y_{a.t}$ es la fracción de maclas de recocido transformadas, X_t es la fracción de volumen de ferrita transformado, $\rho(p)$ es la densidad de dislocaciones, I_d es la velocidad de nucleación por unidad de longitud de dislocaciones.

El número total de granos de ferrita formados en los tres tipos de sitios está dado por:

$$n_T = n_{g.b} + n_{a.t} + n_i \quad (2.19)$$

De ahí se puede concluir que el tamaño de grano formado desde la austenita deformada será el dado por la Ec. 2.14.

2.8.- RELACIONES EXPERIMENTALES QUE PREDICEN EL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO EN ENFRIAMIENTO CONTINUO.

Existen en la literatura una gran cantidad de publicaciones con mediciones experimentales del tamaño de grano ferrítico, que proponen modelos empíricos basados en estas mediciones, sólo se presentarán aquí algunos de ellos por ser los demás equivalentes.

Sellars [28] ajusta una relación a los datos de Niltawach y Albones [29], sobre aceros de bajos residuales C-Mn, encontrando dependencia del tamaño de grano ferrítico final con el tamaño de grano austenítico y la velocidad de enfriamiento,

$$D_{\alpha} = 11.7 + 0.14D_{\gamma} + 37.7R^{-\frac{1}{2}} \quad (2.20)$$

donde el tamaño de grano es medido en μm , la variación del tamaño de grano austenítico (D_{γ}) es de 20 a $100\mu\text{m}$, la velocidad de enfriamiento (R) esta dada en $^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$ y su variación es de 3.6 a $120^{\circ}\text{C}/\text{minuto}$. Los tamaños de grano predichos por esta ecuación son probablemente más grandes que los esperados en aceros comerciales, pero menores a los observados por Sekine y Murayama [30], según cita el propio Sellars [28].

Campbell, Hodgson, Lee y Gibbs [31] proponen la siguiente ecuación para el tamaño de grano ferrítico final en aceros C-Mn,

$$D_{\alpha} = (\beta_0 + \beta_1 C_{eq}) + (\beta_2 + \beta_3 C_{eq}) \bar{T}^{\frac{1}{2}} + \beta_4 (1 - \exp(-\beta_5 D_{\gamma})) \quad (2.21)$$

donde C_{eq} (carbono equivalente) = $C + \text{Mn}/6$, con una variación de 0.1 a 0.6, T es la velocidad de enfriamiento en $^{\circ}\text{C}/\text{segundo}$, con una variación de 0.1 a 10, D_{γ} es el tamaño de grano austenítico que varía entre 20 y $70\mu\text{m}$. Las constantes están dadas en la Tabla I.

TABLA I

	$C_{eq} < 0.35$	$C_{eq} > 0.35$
β_0	-0.4	22.6
β_1	6.37	-57.0
β_2	24.2	3.0
β_3	59.0	0.0
β_4	22.0	22.0
β_5	0.015	0.015

Los autores comentan que esta ecuación muestra los efectos de la composición química sobre la contribución de la velocidad de enfriamiento en el tamaño de grano ferrítico. Pero se ha observado que cuando C_{eq} es mayor de 0.35, la composición química no tiene efecto sobre la velocidad de enfriamiento ($\beta_3=0$).

Umemoto y Tamura [32] encuentran también una relación experimental para un acero Fe-0.15C, donde el tamaño de grano ferrítico esta dado por,

$$D_f = 5.7 Cr^{-0.26} D_a^{0.46} \quad (2.22)$$

donde Cr es la velocidad de enfriamiento en $^{\circ}C/segundo$, y D_a es el tamaño de grano austenítico dado en μm .

2.9.- DATOS DE VARIABLES REQUERIDAS EN EL MODELO Y DISPONIBLES EN LA LITERATURA.

A continuación se mostrarán algunos datos experimentales útiles para el cálculo de la cinética de transformación de fase de austenita a ferrita.

Sin duda alguna, los datos experimentales más importantes para el cálculo de la cinética de transformación de fase son las tensiones superficiales austenita-austenita ($\sigma_{\gamma\gamma}$) y ferrita-austenita ($\sigma_{\alpha\gamma}$). En la Tabla II se muestra como dichas tensiones disminuyen cuando aumenta el contenido de carbono, y son experimentalmente independientes de la temperatura.

TABLA II

%C	Temp. °C	$\sigma_{\gamma\gamma}$ mJ/m ² REF. [33]	$\sigma_{\alpha\gamma}$ mJ/m ² REF. [33]
0.13	825	715	620
0.13	815	715	620
0.13	800	715	620
0.32	780	640	540
0.32	770	640	540
0.63	735	545	460
0.63	725	545	460

CAPITULO 3.

Otro de los datos interesantes es el calor latente de transformación (L) de austenita a ferrita, se tiene que para hierro puro es de 170 cal/mol [34] y para un acero con 0.34C-0.7Mn es de 776 cal/mol [21]. Se puede apreciar como el calor latente de transformación aumenta con la composición química del acero.

Los datos de L de los aceros de bajo carbono, se maneja como el calor latente de transformación de la austenita a ferrita, tomando en cuenta el cambio de entropía de la transformación. La misma se puede manejar de la siguiente manera: $L = T \Delta S$, donde T es la temperatura de transformación y ΔS es el cambio de entropía de la transformación. En el caso de los aceros de bajo carbono, se puede considerar que el calor latente de transformación es el mismo que el de los aceros de alto carbono, por lo que se puede utilizar el mismo valor de L para los aceros de bajo carbono. En el caso de los aceros de alto carbono, se puede considerar que el calor latente de transformación es el mismo que el de los aceros de bajo carbono, por lo que se puede utilizar el mismo valor de L para los aceros de alto carbono.

En este capítulo se presentará un modelo en donde los sitios posibles de nucleación se consideran distribuciones de átomos de carbono y boro en la superficie de los aceros de bajo carbono. Cuando el tamaño de los átomos es muy grande, la velocidad de crecimiento será el doble del de Zener [4] y la velocidad de nucleación será constante, con un evento probabilístico, donde el tamaño de los átomos posibles de nucleación será tomado en cuenta.

CAPITULO 3.

MODELO PROPUESTO PARA LA TRANSFORMACION DE AUSTENITA A FERRITA EN ACEROS DE BAJO CARBONO.

3.1.- INTRODUCCION.

Para predecir el tamaño de grano ferrítico final a partir de los mecanismos de nucleación y crecimiento, se necesita conocer el comportamiento de estos en función de la composición química, tamaño de grano austenítico, deformación, temperatura y tiempo. La manera de estimar la dependencia de estos mecanismos con los factores anteriormente mencionados, es la siguiente: Se suponen sitios posibles de nucleación, formas de los precipitados para los sitios seleccionados, se evalúa la velocidad de crecimiento para la forma de los precipitados y se suponen velocidades de nucleación en función de las características del acero. Con las condiciones anteriores se debe de reproducir la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica (TTT) para considerar las suposiciones válidas.

En este capítulo se propondrá un modelo en donde los sitios posibles de nucleación serán distribuciones de ángulos de esquinas y bordes, los núcleos de superficie se considerarán como embriones de borde con un ángulo muy grande, la velocidad de crecimiento será el modelo difusional de Zener [9] y la velocidad de nucleación se considerará como un evento probabilístico, donde el consumo de los sitios posibles de nucleación será tomado en cuenta.

Suponiendo que una transformación a enfriamiento continuo puede ser considerada como la suma de pequeños intervalos de tiempo isotérmicos en sucesivas temperaturas, se utilizarán las velocidades de nucleación y crecimiento isotérmicas obtenidas para calcular el tamaño de grano ferrítico final.

3.2.- VELOCIDAD DE NUCLEACION.

Supondremos al igual que Cahn [5], ver Cap. 2, que la nucleación se presenta en un material policristalino con frecuencias características en cuatro tipos de sitios. Se puede designar a la frecuencia de nucleación homogénea por unidad de volumen I_v , la frecuencia de nucleación en la superficie de grano por unidad de área como I_s , la frecuencia de nucleación en borde por unidad de longitud como I_e y la frecuencia de nucleación en esquina por esquina como I_c . Podemos también definir las frecuencias de nucleación por unidad de volumen para cada tipo de sitio, \dot{N}_v , \dot{N}_s , \dot{N}_e y \dot{N}_c . Si S_v , L_v y C_v son respectivamente el área de la superficie, la longitud de borde, y el número de esquinas por unidad de volumen, entonces:

$$\dot{N}_v = I_v \quad (3.1a)$$

$$\dot{N}_s = S_v I_s \quad (3.1b)$$

$$\dot{N}_e = L_v I_e \quad (3.1c)$$

$$\dot{N}_c = C_v I_c \quad (3.1d)$$

La velocidad de nucleación total por unidad de volumen será:

$$\dot{N} = \dot{N}_v + \dot{N}_s + \dot{N}_e + \dot{N}_c \quad (3.2)$$

La frecuencia de nucleación la estimaremos como la probabilidad de que un átomo salte desde la vecindad de un núcleo de tamaño crítico, hacia él, de tal manera que al sumarse un átomo más se convierta en un núcleo estable, sin posibilidades de que se disuelva. Además, le agregaremos un término que tomará en cuenta el consumo de los sitios posibles de nucleación, o sea, los sitios en función del tiempo de la transformación, Sec. 3.4.

Las frecuencias de nucleación serán el producto de varias probabilidades y estarán dadas por:

$$I_v = v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) C_{1v} \exp\left(-\frac{\Delta G_v^*}{RT}\right) \quad (3.3a)$$

$$I_s = v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) C_{1s} \exp\left(-\frac{\Delta G_s^*}{RT}\right) \quad (3.3b)$$

$$I_e = v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) C_{1e} \exp\left(-\frac{\Delta G_e^*}{RT}\right) \quad (3.3c)$$

$$I_c = v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) C_{1c} \exp\left(-\frac{\Delta G_c^*}{RT}\right) \quad (3.3d)$$

3.2.1.- NUCLEACIÓN EN ESQUINAS DE GRANO.

donde, $\exp(-\Delta G^*/RT)$ es la probabilidad de que existan núcleos críticos con una energía de activación ΔG^* , $\exp(-Q/RT)$ es la probabilidad de que el átomo difunda, v es la frecuencia de salto del átomo, Q es la energía de activación para la autodifusión, ΔG_v^* , ΔG_s^* , ΔG_e^* y ΔG_c^* son respectivamente las energías de activación para la nucleación: homogénea, en superficie, en borde y en esquina, C_{1v} , C_{1s} , C_{1e} y C_{1c} son respectivamente las concentraciones de sitios posibles de nucleación por unidad de volumen, por unidad de área, por unidad de longitud y por esquina, al inicio de la transformación. En la Sec. 3.4 se obtendrán estos sitios en función del tiempo de la transformación.

La interfase del austenita dentro del grano austenítico, que es referida. Los parámetros S_v , L_v y C_v van a depender del tamaño de grano austenítico y del grado de deformación. Por ejemplo, si se considera nucleación en la superficie de grano, los sitios posibles de nucleación serán las vacancias cerca de la frontera y se pueden relacionar con la superficie por unidad de volumen S_v , que se puede estimar en función del tamaño de grano austenítico. Si existe deformación en el material S_v aumentará y de igual manera lo harán los sitios posibles de nucleación, pero como se comentó en la Sec.

2.7.2, el incremento en la velocidad de transformación en un material deformado, se debe principalmente a las serraciones o escalones que presenta la superficie de grano, y el aumento de la superficie contribuye sólo un poco.

3.2.1.- NUCLEACION EN ESQUINAS DE GRANO.

En la Fig. 5 se observa un núcleo de ferrita formado en la esquina de un grano, el cual debe de tener una superficie austenita-ferrita que minimice la energía libre para el volumen ocupado. Este núcleo se presenta en uno sólo de los granos austeníticos involucrados en la esquina, pues es la única manera de asegurar una superficie semi-coherente entre el núcleo y la austenita en su alrededor. Estas superficies semi-coherentes, como las que se describen por la relación Kurdjumov-Sachs ($\{111\}_\gamma // \{110\}_\alpha$, $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 111 \rangle_\alpha$) [3] son requeridas para garantizar que las tensiones interfaciales ($\sigma_{\alpha\gamma 2}$) sean de baja energía, 0.2-0.5 J/m², y por lo tanto minimizan la energía libre total del núcleo. La interfase que está dentro del grano austenítico, que es esférica, es de más alta energía ($\sigma_{\alpha\gamma 1}$) pero ocupa la mayor cantidad de volumen posible con una superficie mínima.

Se ha observado metalográficamente [35] que los núcleos de ferrita tienen la forma descrita anterior.

A la forma del núcleo de la Fig. 5a se le puede aproximar una pirámide triangular como lo muestra la Fig. 5b. Si las tensiones

superficiales austenita-austenita ($\sigma_{\gamma\gamma}$) de los cuatro granos que forman una esquina son iguales, el ángulo de equilibrio será de $109^{\circ}28'$ [1,3].

Consideremos un ángulo φ entre tensiones, dado que las $\sigma_{\gamma\gamma}$ pueden ser distintas entre sí y el ángulo de equilibrio diferirá del antes mencionado. Aquí se tomará que el ángulo φ es igual entre las tensiones que forman la esquina de un grano, sólo para tener una mayor simplicidad de cálculo, pero en realidad este ángulo variará entre cada par de tensiones.

Con la anterior suposición tendremos entonces que tres tensiones superficiales son iguales, y la cuarta balanceará a las otras para que se establezca el equilibrio.

En la Fig. 5c se muestra un corte longitudinal de la pirámide, en la cual se considera que la altura es h , la tensión superficial austenita-austenita es $\sigma_{\gamma\gamma}$, las tensiones superficiales ferrita-austenita son $\sigma_{\alpha\gamma 1}$ (alta energía) y $\sigma_{\alpha\gamma 2}$ (baja energía), y θ es el ángulo entre estas tensiones.

La energía de activación para la nucleación en una esquina con un ángulo φ , sin considerar efectos de deformación, estará dada por (Apéndice I):

$$\Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma_{\alpha\gamma 1}^3}{\Delta G_V^2} S(\varphi, \theta) \quad (3.4a)$$

donde

3.2.2 - NUCLEACION EN BORDOS

$$S(\varphi, \theta) = \frac{\sqrt{2}}{8\pi} \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} [1 - \text{fact}]^3 \text{factor} \quad (3.4b)$$

$$\text{factor} = [\text{Csc}^2\theta + \text{Csc}^2(\pi - \varphi - \theta) - 2\text{Csc}\theta\text{Csc}(\pi - \varphi - \theta)\text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4c)$$

$$\text{fact} = \frac{3 \text{Cot}\theta}{\text{factor}}$$

esta energía se expresó como la energía de activación para la nucleación homogénea, multiplicada por el factor $S(\varphi, \theta)$. El valor numérico de $S(\varphi, \theta)$ es $\ll 1$, como se verá en la Sec. 3.7, y dado que sólo depende de φ y θ , o sea de la forma del núcleo, lo llamaremos factor forma.

Haciendo un balance de tensiones a lo largo de la frontera de grano (Fig. 4c) tenemos que,

$$\text{Cos}\theta = \frac{\sigma_{\gamma\gamma} - \sigma_{\alpha\gamma 2}}{\sigma_{\alpha\gamma 1}} \quad (3.4d)$$

y la altura crítica del núcleo será

$$h^* = \frac{2\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G_V} [1 - fact] \quad (3.4e)$$

3.2.2.- NUCLEACION EN BORDES.

En la Fig. 6a se observa un corte transversal y otro longitudinal de un grano de ferrita nucleado en un borde de grano, nuevamente se seleccionó la forma del grano de tal manera que la superficie austenita-ferrita minimice la energía libre para el volumen ocupado, ϕ es el ángulo entre tensiones superficiales austenita-austenita ($\sigma_{\gamma\gamma}$), θ es el ángulo entre las tensiones ferrita-austenita ($\sigma_{\alpha\gamma 1}$ y $\sigma_{\alpha\gamma 2}$), Ψ es el ángulo entre la línea de borde y la tensión superficial ferrita-austenita.

La energía de activación para este tipo de núcleo se puede calcular si aproximamos su forma al de la Fig. 6b, donde h es la altura del núcleo y $h \cot \psi$ es su longitud. La energía de activación estará dada por (Apéndice I):

$$\Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma_{\alpha\gamma 1}^3}{\Delta G_V^2} S(\phi, \theta, \psi) \quad (3.5a)$$

donde

$$S(\phi, \theta, \psi) = \frac{1}{2\pi} \tan^2(\psi) \text{Sen}\left(\frac{\phi}{2}\right) \text{Csc}\theta \text{Sen}\left(\frac{\phi}{2} + \theta\right) (fact1)^3 \quad (3.5b)$$

3.3.- VELOCIDAD DE CRECIMIENTO

$$fact1 = \frac{\sqrt{\cot^2 \Psi + \text{Sen}^2 \left(\frac{\Phi}{2} + \theta \right)}}{\text{Sen} \left(\frac{\Phi}{2} + \theta \right)} - \frac{\cot \Psi \cos \theta}{\text{Sen} \frac{\Phi}{2}} \quad (3.5c)$$

La velocidad de crecimiento de un núcleo homogéneo en un medio homogéneo se considera un modelo difusional, desarrollo de un núcleo homogéneo en un medio homogéneo. La concentración de carbono en el precipitado es C_p , en tanto que en la matriz austenítica es C_m . Se sabe que la concentración en el precipitado es menor que en la matriz, la interfase del precipitado estará sujeta a un enriquecimiento de carbono hasta alcanzar un equilibrio con la ferrita, esta concentración será C_i . Haciendo un balance de tensiones a lo largo de la frontera de grano tenemos que,

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{\gamma\gamma} - \sigma_{\alpha\gamma 2}}{\sigma_{\alpha\gamma 1}} \quad (3.5d)$$

y la altura crítica del núcleo es

$$h^* = \frac{2\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G_v} \frac{fact1}{\cot \Psi} \quad (3.5e)$$

Este modelo considera una interfase plana, si se toma una ligeramente curvada, los resultados se obtendrán no diferirán en forma importante de los obtenidos para la plana (3). En el caso de ferrita esferular se tendrá que modificar la velocidad de crecimiento debido a que la interfase de crecimiento tiene una gran curvatura. Con respecto a las formas de los núcleos de esquinas y bordes, se tiene que estos son una sección de un núcleo homogéneo, Fig. 6c, y por ello las energías de activación se pueden expresar como la energía de activación de un núcleo homogéneo, multiplicado por un factor de forma, que será numéricamente mucho menor que uno.

3.4.- ANÁLISIS DE LOS SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

La forma aproximada de los núcleos de ferrita que han sido observados experimentalmente en la superficie de grano [11], es de

3.3.- VELOCIDAD DE CRECIMIENTO.

La velocidad de crecimiento de la ferrita estará dada por el modelo difusional desarrollado por Zener [9], donde se considera un núcleo con una interfase plana como se muestra en la Fig. 7. La concentración de carbono en el precipitado es C_α , en tanto que en la matriz austenítica es C_0 . Debido a que la concentración en el precipitado es menor que en la matriz, la interfase del precipitado estará sujeta a un enriquecimiento de carbono hasta alcanzar su concentración de equilibrio con la ferrita, esta concentración será C_γ .

Entonces, este modelo predice una velocidad de crecimiento parabólica en la dirección normal de la frontera de grano descrito por las Ecs. 2.6 y 2.7.

Entonces, la fracción de área transformada f , por unidad de área. Este modelo considera una interfase plana, si se toma una ligeramente curvada los resultados que se obtendrán no diferirán en forma importante de los obtenidos para la planar [3]. En el caso de ferrita acicular se tendrá que modificar la velocidad de crecimiento debido a que la interfase de crecimiento tiene una gran curvatura.

3.4.- CONSUMO DE LOS SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

La forma aproximada de los núcleos de ferrita que han sido observados experimentalmente en la superficie de grano [11], es de

dos casquetes esféricos con una relación de radios de 3:1, Fig. 8, el radio menor es normal a la frontera de grano y el radio mayor está a lo largo de la superficie de grano. La cantidad de área que ocupa un núcleo sobre la superficie de grano es πr^2 , donde r es el radio mayor del núcleo.

Un grano que se nuclea al inicio de la transformación tendrá una área cubierta de $\pi(3\alpha t^{1/2})^2 = 9\pi\alpha^2 t$, a un tiempo t después de que comenzó la transformación. La velocidad de crecimiento sobre la superficie de grano es $3\alpha t^{1/2}$, Ec. 2.6. El área de un grano nucleado a un tiempo τ después de que comenzó la transformación será $9\pi\alpha^2(t-\tau)$. El número de núcleos que se forman en un incremento de tiempo $d\tau$ por unidad de área es $I_s d\tau$.

Entonces, la fracción de área transformada f_a por unidad de área será la suma de todas las áreas de los núcleos formados desde el inicio de la transformación ($\tau=0$) hasta $\tau=t$, dada por

$$f_a = \int_0^t 9\pi\alpha^2 I_s (t-\tau) d\tau = \frac{9\pi}{2} \alpha^2 I_s t^2 \quad (3.6a)$$

La anterior ecuación se puede utilizar sólo para $f_a \ll 1$, por que sólo es válida para los inicios de la transformación, como pase el tiempo los precipitados chocarán unos con otros y la velocidad de nucleación disminuirá. Si se considerará que la nucleación permanece constante, f_a será mayor que uno para tiempos grandes.

Entonces, para tiempos finitos la ecuación que se utiliza para velocidades de nucleación constantes es la siguiente,

$$F_{as} = 1 - \exp\left(-\frac{9\pi}{2} \alpha^2 I_s t^2\right) \quad (3.6b)$$

esto es por que para tiempos cortos $F_{as} = 1 - \exp(-f_a) \cong f_a$ y para tiempos grandes cuando $t \rightarrow \infty$, $F_{as} \rightarrow 1$. La fracción de área sin transformar será $1 - F_{as} = \exp(-f_a)$.

Bordes

De igual manera se calculan las fracciones transformadas de borde por unidad de longitud (Apéndice II):

$$F_{ae} = 1 - \exp(-4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}}) \quad (3.6c)$$

Esquinas

la fracción transformada de esquina (Apéndice II):

$$F_{ac} = 1 - \exp(-I_c t) \quad (3.6d)$$

donde los C_{1v} , C_{1e} , C_{1c} y C_{1s} tiene el mismo significado que en la Sec. 3.2.

y la fracción de sitios transformados en nucleación homogénea, esta dada por (Apéndice III):

3.4.1.- FRACCIÓN TRANSFORMADA.

En la sección anterior se probó que la forma aproximada de los núcleos de ferrita que han sido observados experimentalmente en la superaleación de grano fino, es de dos casquetes esféricos con una relación de radios de 3:2, a la cual se le puede aproximar bastante bien. De las ecuaciones anteriores tenemos que los sitios posibles de nucleación a cualquier tiempo serán $C_s(1-F_s)$:

Homogénea

$$C_{1v}^* = C_{1v} \exp\left(-\frac{8\pi}{15} \alpha^3 N_v t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (3.7a)$$

Superficies

$$C_{1s}^* = C_{1s} \exp\left(-\frac{9\pi}{2} \alpha^2 I_s t^2\right) \quad (3.7b)$$

Bordes

$$C_{1e}^* = C_{1e} \exp\left(-4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}}\right) \quad (3.7c)$$

Esquinas

$$C_{1c}^* = C_{1c} \exp(-I_c t) \quad (3.7d)$$

donde los C_{1v} , C_{1s} , C_{1e} y C_{1c} tiene el mismo significado que en la Sec. 3.2.

3.4.1.- FRACCION TRANSFORMADA.

En la sección anterior se comentó que la forma aproximada de los núcleos de ferrita que han sido observados experimentalmente en la superficie de grano [11], es de dos casquetes esféricos con una relación de radios de 3:1, a la cual se le puede aproximar bastante bien una elipse de revolución o lenticula, Fig. 8.

siguiendo el método de volúmenes extendidos, calcularemos la fracción de volumen transformado a un tiempo t después de que comenzó la transformación, tenemos que:

El volumen de una elipsoide es $\frac{4\pi b^2 a}{3}$, donde b es la longitud del semieje menor y a la del semieje mayor. El volumen de un grano que es nucleado al inicio de la transformación es $\frac{4\pi \alpha^3 t^{3/2}}{3}$, aquí se sustituyó $a=3\alpha t^{1/2}$ y $b=\alpha t^{1/2}$ que son los radios de la ferrita al tiempo t . Un grano de ferrita nucleado a un tiempo τ después de que comenzó la transformación, tiene un volumen de $\frac{4\pi \alpha^3 (t-\tau)^{3/2}}{3}$.

El número de núcleos que se forman en un incremento de tiempo $d\tau$ es $N_s d\tau$. Entonces la fracción transformada f por unidad de volumen es la suma de todos los volúmenes de los núcleos formados desde el inicio de la transformación ($\tau=0$) hasta $\tau=t$, dada por:

$$f = \int_0^t 4\pi \alpha^3 N_s (t-\tau)^{3/2} d\tau = \frac{8\pi}{5} \alpha^3 N_s t^{5/2} \quad (3.8a)$$

Esta ecuación se puede utilizar sólo para $f \ll 1$, por lo que se comentó en la sección anterior, y para cualquier tiempo la ecuación que se utiliza es la siguiente:

$$F_s = 1 - \exp\left(-\frac{8\pi}{5} \alpha^3 N_s t^{5/2}\right) \quad (3.8b)$$

La ecuación anterior puede servir también para calcular la fracción transformada cuando la nucleación se presenta en bordes de grano, debido a que la forma geométrica de los precipitados es similar.

transformación, estará dada por

De igual manera se pueden obtener las fracciones transformadas para nucleación en esquinas, la forma del núcleo se muestra en la Fig. 4, y la deducción se presenta en el Apéndice III:

$$F_c = 1 - \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{15} \alpha^3 fec N_c t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (3.8c)$$

del tiempo se tiene entonces

donde

$$fec = Csc(\pi - \varphi - \theta) [1 - Cos\varphi]^{\frac{1}{2}} \text{factor} \quad (3.8d)$$

el termino **factor** es dado por la Ec. 3.4c, y para nucleación homogénea (Apéndice III),

$$F_v = 1 - \exp\left(-\frac{8\pi}{15} \alpha^3 N_v t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (3.8e)$$

Entonces la fracción transformada total será

$$F_T = 1 - \exp\left(-\left[\frac{\sqrt{2}}{15} fec N_c + \frac{8\pi}{5} (N_e + N_s) + \frac{8\pi}{15} N_v\right] \alpha^3 t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (3.9)$$

3.5.- CANTIDAD DE GRANOS NUCLEADOS ISOTERMICAMENTE.

El número de granos nucleados por unidad de volumen en una transformación isotérmica a un tiempo t después de que comenzó la transformación, estará dada por

$$n = \int_0^t \dot{N} dt = \int_0^t (\dot{N}_v + \dot{N}_s + \dot{N}_e + \dot{N}_c) dt = n_v + n_s + n_e + n_c \quad (3.10a)$$

donde si se consideran los sitios posibles de nucleación en función del tiempo se tiene entonces

$$n_v = \int_0^t \dot{N}_v dt = C_{1v} v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_v^*}{RT}\right) \int_0^t \exp\left(-\frac{8\pi}{15} \alpha^3 I_v t^{\frac{5}{2}}\right) dt \quad (3.10b)$$

$$n_s = \int_0^t \dot{N}_s dt = S_v C_{1s} v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_s^*}{RT}\right) \int_0^t \exp\left(-\frac{9\pi}{2} \alpha^2 I_s t^2\right) dt \quad (3.10c)$$

$$n_e = \int_0^t \dot{N}_e dt = L_v C_{1e} v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_e^*}{RT}\right) \int_0^t \exp\left(-4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}}\right) dt \quad (3.10d)$$

$$n_c = \int_0^t \dot{N}_c dt = C_v C_{1c} v \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_c^*}{RT}\right) \int_0^t \exp(-I_c t) dt \quad (3.10e)$$

3.5.1.- CANTIDAD DE GRANOS NUCLEADOS A ENFRIAMIENTO CONTINUO.

Para enfriamiento continuo podemos considerar que el material permanecerá un intervalo de tiempo en cada grado de temperatura, dicho intervalo dependerá de la velocidad de enfriamiento, entonces si sumamos los granos nucleados en cada grado de temperatura tendremos el número total a una cierta velocidad de enfriamiento, por ejemplo para granos nucleados en los bordes tendremos

$$n_e = \sum_{T_i=T_{Ae3}}^{T_F} L_V C_{1e} v \exp\left(-\frac{Q}{RT_i}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_c^*}{RT_i}\right) \int_{t_1}^{t_2} \exp\left(-4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}}\right) dt \quad (3.11)$$

donde la sumatoria va desde la temperatura de transformación de equilibrio (T_{Ae3}), hasta la temperatura en donde comienza la transformación de cementita (T_F) a una cierta velocidad de enfriamiento como lo predice Scheil [15].

t_1 es el tiempo desde que en el material comenzó la nucleación en el ángulo seleccionado hasta llegar a la temperatura T_i , y t_2 es el tiempo hasta el cual permaneció a la temperatura T_i , la temperatura para el inicio de la nucleación en el ángulo seleccionado la obtenemos de la Ec. 3.3c, como se discutirá en las Secs. 3.7.1 y 3.7.3, más tarde se verá que la nucleación comenzará primero en bordes de ángulo pequeño y como disminuya la temperatura continuará en ángulos más grandes, t_1 y t_2 se conocen fácilmente con la velocidad de enfriamiento.

63090

3.7.- METODOLOGÍA PARA LA REPRODUCCIÓN DE LA ZONA FERRÍTICA

Debido a que t_1 es el tiempo necesario para que la fracción de sitios disponibles para la nucleación sea la misma que al tiempo t_2 de la temperatura anterior, la sumatoria sobre la temperatura debe ser de pequeños incrementos para que $\alpha(T_i) \approx \alpha(T_{i+1})$ y $I_e(T_i) \approx I_e(T_{i+1})$.

De la misma manera se calculan los granos nucleados en las esquinas y superficie de grano. bordes y ondulaciones de la superficie (Sec. 3.7.3.2), y la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica se reproduce suponiendo distribuciones de

3.6.- RADIO PROMEDIO DE LA FERRITA A ENFRIAMIENTO CONTINUO.

El radio promedio de la ferrita estará dado por

$$R = \sum_{i=1}^n R_i W \quad (3.12a)$$

3.7.1.- CALCULO DE LA ENERGÍA DE ACTIVACION ΔG^*

De la Ec. 3.4a se observó que los parámetros desconocidos para donde R_i es el radio de la ferrita que fué nucleado a la temperatura T_i , obtenida a partir de la Ec. 2.13.

La fracción de granos con R_i (W) estará dado como:

$$W = \frac{n_v(T_i) + n_s(T_i) + n_e(T_i) + n_c(T_i)}{n_v + n_s + n_e + n_c} \quad (3.12b)$$

3.7.- METODOLOGIA PARA LA REPRODUCCION DE LA ZONA FERRITICA DE UN DIAGRAMA DE TRANSFORMACION ISOTERMICA (TTT).

A continuación se describirá la manera en que se calcularon las energías de activación para la nucleación, las distribuciones de esquinas y bordes que se utilizaron, y la manera en que se estimaron los sitios posibles de nucleación. La fracción transformada de material será la suma de las contribuciones de los granos nucleados en esquinas, bordes y ondulaciones de la superficie (Sec. 3.7.3.2), y la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica se reproduce suponiendo distribuciones de esquinas y bordes, considerando que las ondulaciones en la superficie son un caso especial de bordes. Primeramente se trabajó con un acero 1008 (0.06C-0.43Mn), con un tamaño de grano austenítico 7 ASTM (27.6 μm) [36,37].

3.7.1.- CALCULO DE LA ENERGIA DE ACTIVACION ΔG^* .

De la Ec. 3.4a se observa que los parámetros desconocidos para evaluar ΔG^* son el ángulo entre tensiones austenita-austenita (φ), y el ángulo entre tensiones ferrita-austenita (θ), ΔG_v esta dado por la Ec. 2.2 y $\sigma_{\alpha\gamma 1}$ es un dato experimental, pero debido a que $\sigma_{\alpha\gamma 1}$ dependerá del sitio posible de nucleación, entonces conviene más expresarla en función de $\sigma_{\gamma\gamma}$ y de $\sigma_{\alpha\gamma 2}$ (Ec. 3.4d) las cuales se pueden mantener constantes y son datos experimentales conocidos [33]. Si se mantiene constante la relación entre φ y θ , se puede calcular la energía de activación para los ángulos φ , en función del Se estimó la relación entre φ y θ de la siguiente manera: En

la Ec. 3.4e se puede suponer una altura crítica del núcleo (h^*) para un subenfriamiento de 1°K y un ángulo φ entre tensiones, con estos datos se puede determinar θ para esas condiciones. Después se sustituyeron en la Ec. 3.4a los valores de φ y θ , y se obtuvo el valor de ΔG^* para la altura crítica supuesta a 1°K de subenfriamiento. Se observó que para una misma altura crítica, el valor de $\Delta G^*_{\varphi_1} < \Delta G^*_{\varphi_2}$ si $\varphi_1 < \varphi_2$, esto significa que la energía de activación decrecerá cuando disminuya el ángulo φ entre tensiones, lo anterior también se observó para los bordes. Además ΔG^* (para φ de esquina de equilibrio) $< \Delta G^*$ (de φ de borde de equilibrio) $< \Delta G^*$ (para núcleo de superficie). Sin embargo existen ángulos de esquinas y bordes que tiene la misma energía de activación, esto es, una esquina de ángulo grande puede tener la misma energía que la de un borde de ángulo pequeño.

Hay que mencionar aquí que el ángulo ψ que aparece en el núcleo de borde, Fig. 6, es el mismo que el ángulo θ del núcleo de superficie. Por lo tanto al suponer una altura crítica se conoce θ (en el núcleo de superficie (Ec. 2.3b) y también ψ del núcleo de borde. Si se mantiene constante la relación entre φ_1 y θ_1 , se puede calcular la energía de activación para los ángulos φ_1 en función del subenfriamiento, Fig. 9, de igual manera se puede realizar para

los bordes, Fig. 10. Con estas energías de activación se pueden calcular las velocidades de nucleación (Ec. 3.3) en función del subenfriamiento, y se observa un comportamiento en forma de una curva C, Fig. 11 para esquinas y Fig. 12 para bordes, en el cual las esquinas de ángulo ϕ pequeño tienen una velocidad de nucleación perceptible a subenfriamientos pequeños, mientras que las de ángulo grande no presentan nucleación, pero a subenfriamientos mayores su velocidad decae, mientras que las de ángulo grande presentan una velocidad de nucleación notable.

Debido a que a un dado subenfriamiento algunos sitios de nucleación (ángulos de esquinas y bordes) contribuyen más que otros a la velocidad de transformación, se puede reproducir completamente el diagrama TTT seleccionando una distribución de ángulos, y sumando la contribución de cada uno a la velocidad de nucleación total. Este procedimiento determina entonces, la única distribución de sitios de nucleación capaz de reproducir el TTT.

3.7.2.- ALTURA DEL NUCLEO CRITICO.

Si se selecciona una altura de núcleo crítico pequeña ($h^* = 1 \times 10^{-8}$ m) para un subenfriamiento de 1°K , al aumentar el subenfriamiento y mantener fija la relación entre ϕ_i y θ_i , la altura del núcleo crítico decrece hasta ser más pequeña que el radio atómico del hierro, lo cual es físicamente imposible. Al seleccionar una altura más grande ($h^* = 5 \times 10^{-8}$ m) se presentaron núcleos de altura crítica aceptable para todo el grado de suben-

friamiento que presenta la zona ferrítica del TTT, pero la nucleación en superficies se presentó a un subenfriamiento en donde los sitios posibles de nucleación se consumían rápidamente y se obtenía el final para la transformación a un tiempo que no coincide con lo que marca el TTT.

Una rápida velocidad de transformación y por lo tanto un consumo rápido de sitios posibles de nucleación se presenta a un subenfriamiento bien definido en los diagramas TTT, y los trabajos teóricos-experimentales realizadas en aceros de bajo carbono [24] indican que la nucleación en superficies se presenta justamente en esos subenfriamientos.

Finalmente seleccionando una altura crítica de 8×10^{-8} m para un subenfriamiento de 1°K , se obtuvo un tamaño físicamente aceptable para cualquier grado de subenfriamiento en la zona ferrítica del TTT (Fig. 13), y los sitios de nucleación que se activaron coinciden con los datos experimentales observados. Es decir, para subenfriamientos pequeños los sitios de nucleación que se activan son esquinas de grano, las cuales son una cantidad muy limitada; una vez que se hayan consumido todos los sitios, la rapidez de transformación dependerá de la velocidad de crecimiento de estos, pero por ser pocos los granos nucleados, la velocidad de transformación se volverá lenta, lo anterior se puede decir también para los bordes a subenfriamientos un poco mayores, pero no para superficies, cuando se alcance el subenfriamiento requerido para su

posible nucleación, debido a la gran cantidad de sitios posibles para nucleación, entonces la transformación se acelerará.

3.7.3.- DISTRIBUCIONES DE ANGULOS UTILIZADAS.

Para poder reproducir el diagrama de transformación isotérmica en forma completa se necesitarán ángulos más pequeños y más grandes que el de equilibrio, en esquinas y bordes. Pero se deben de suponer distribuciones en donde el ángulo de equilibrio sea el que cuente con la mayor cantidad de sitios posibles de nucleación.

3.7.3.1.- DISTRIBUCION DE ESQUINAS.

Al seleccionar la altura del núcleo crítico como 8×10^{-8} m los ángulos requeridos para reproducir el TTT van desde 25° hasta 140° . La explicación del por que se requieren ángulos tan pequeños es la siguiente: Al realizar el modelo del núcleo de ferrita en la esquina de grano, se dejó que los ángulos entre las tensiones que forman la esquina (Fig. 5) fueran todos iguales, que, en la realidad, es tan sólo un caso particular. Pero lo importante es que habrá una equivalencia entre la forma de los núcleos seleccionados (ϕ igual entre tensiones) y la que deben de tener en realidad (ϕ diferente entre cada par de tensiones), con lo que respecta a la energía que necesitaran para activarse.

Para ángulos mayores al de equilibrio, la energía de activación crece muy rápido con el ángulo, por su crecimiento rápido en área superficial, y entonces las energías de activación de estos

ángulos se traslapan con las de los ángulos de borde menores al de equilibrio. Por la razón anterior la distribución que se propone es la mostrada en la Fig. 14.

Podemos considerar que la distribución que obtuvimos, Fig. 13, es la La distribución que se muestra en la Fig. 14 es la que reproduce el diagrama TTT en forma más satisfactoria que cualquier otra. Se probaron distribuciones con distinta desviación estandar, pero estas sólo reproducían el TTT en forma parcial.

En la figura 15 se muestra la relación entre ϕ (fi) y θ (teta) obtenida para la altura del núcleo crítico seleccionado.

3.7.3.2.- DISTRIBUCION DE BORDES.

La distribución de ángulos de borde que puede reproducir el diagrama TTT no presenta un valor máximo en el ángulo de equilibrio (Fig. 16), debido a que para ángulos mayores a este la cantidad de sitios disponibles aumentan con el ángulo. Esto se puede explicar en base a que la superficie de grano puede presentar ondulaciones Fig. 17, las cuales presentan una energía de activación similar a la que presentan núcleos de borde de ángulo mayor al de equilibrio. Las ondulaciones se presentan en la superficie debido a que en la frontera de grano el ordenamiento cristalino se pierde, y se presenta entonces una estructura desordenada [3].

Algunos investigadores [4,20] sugieren que en material deformado se presentan escalones en la superficie de grano, y estos sitios están asociados con una energía de activación similar al de

esquinas y bordes, y por ello la transformación es más rápida en material deformado.

Podemos considerar que la distribución que obtuvimos, Fig. 15, es la suma de dos distribuciones. Una sería simétrica, con un valor máximo en el ángulo de equilibrio, y contaría sólo como sitios posibles de nucleación a los ángulos formados por la unión de tres granos. La otra distribución contaría sólo a los ángulos de las supuestas ondulaciones de la superficie como sitios posibles de nucleación.

Por lo tanto, podemos decir que los granos nucleados en la superficie, son embriones de borde con un ángulo grande. Lo anterior es muy importante, por que permite que los núcleos de superficie mantengan una misma razón de largo y ancho, dado que serán gobernados por la misma ecuación (Fig. 6b, Apéndice I), y con la altura del núcleo crítico seleccionada se tiene que dicha razón es de 3:1 ($\Psi=18^\circ$), que ha sido observada experimentalmente [11].

La Fig. 18 muestra la relación entre ϕ (fi) y θ (teta) para los núcleos de borde.

Entonces la cantidad de vacancias o sitios posibles de nucleación por unidad de longitud (cm) estará dada por:

3.7.4.- SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

Los sitios posibles de nucleación serán todas aquellas vacancias que se encuentren cerca de una esquina, de un borde, de

la superficie o en el volumen de un grano. Esto es por que la reacción de transformación comenzará siempre con el salto de un átomo [6], al cual se le irán sumando otros hasta alcanzar el tamaño crítico en los lugares antes mencionados, o disolverse.

Debido a que las vacancias son un defecto cristalino de equilibrio, la fracción de vacancias que corresponden a una condición de mínima energía libre esta dada por la ecuación 2.5.

Entonces, para estimar los sitios posibles de nucleación (vacancias) por esquina, por unidad de longitud, por unidad de área y por unidad de volumen, hay que calcular la cantidad de sitios atómicos posibles para estos.

La cantidad de sitios atómicos por unidad de longitud se puede estimar de la siguiente manera: El parámetro de red del hierro centrado en las caras es de 3.6×10^{-8} cm; considerando que cada dirección compacta $\langle 110 \rangle$ de la celda de austenita, relaciones Kurdjumov-Sachs [3], colabora con dos sitios atómicos, tenemos que hay 5.5×10^7 sitios/cm.

Entonces la cantidad de vacancias o sitios posibles de nucleación por unidad de longitud (cm) estará dada por:

$$C_{1e} \cdot 10^7 \exp\left(-\frac{U_v}{kT}\right) \quad (3.13a)$$

La cantidad de vacancias por unidad de área (cm²) estará dado por:

$$C_{1s} = 10^{15} \exp\left(-\frac{U_v}{kT}\right) \quad (3.13b)$$

La cantidad de vacancias por unidad de volumen (cm³) estará dado por:

Sitios atómicos posibles = (Densidad/Peso atómico) x N^o de Avogadro

Sitios atómicos posibles = 7.98x10²²

$$C_{1v} = 10^{23} \exp\left(-\frac{U_v}{kT}\right) \quad (3.13c)$$

El cálculo de los sitios posibles de nucleación en una esquina puede ser bastante arbitrario, ya que dependerá de la consideración de que tan grande pueda ser el volumen que ocupe esta.

Para reproducir el diagrama TTT existe algunos parámetros que desconocemos, estos son: la cantidad de esquinas y bordes con un mismo ángulo, por unidad de volumen, o sea los C_v y L_v para cada ángulo de la distribución seleccionada, estos parámetros se ajustan para poder reproducir el TTT.

En el acero (1008), que nos sirvió de base para realizar nuestros cálculos, con un tamaño de grano austenítico 7 ASTM (27.6 μm), y por lo tanto con 10⁷ granos/cm³ (considerando que los granos tienen la forma de equilibrio) [37], y ya que cada grano tiene 24

esquinas y cada esquina es compartida por 4 granos, entonces la cantidad de esquinas totales es del orden de 10^7-10^8 por cm^3 . El valor de C_v para el ángulo de equilibrio que nos reprodujo el TTT fué de 200×10^7 . Por lo cual se pudo concluir que los sitios posibles de nucleación por esquina (C_{1c}) son del orden de 10^1-10^2 .

Los parámetros C_v y L_v que se tuvieron que ajustar no se pueden calcular teóricamente, pero si encontramos como varían en función del tamaño de grano, podríamos estandarizarlos.

3.7.5.- CALCULO DEL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO Y COMPARACION CON DATOS DE LA LITERATURA.

Después de reproducir la zona ferrítica del diagrama de transformación isotérmica para el acero 1008, Fig. 19, tenemos entonces las velocidades de nucleación para la composición química, el tamaño de grano austenítico, la temperatura y el tiempo de interés, por lo tanto utilizando las ecuaciones 3.11 y 3.12 se calcula el tamaño de grano ferrítico en enfriamiento continuo al finalizar la transformación, no se considera aquí el crecimiento de grano ferrítico.

En la Fig. 20 se observa la predicción del modelo, para el tamaño de grano ferrítico en función de la velocidad de enfriamiento para un acero 1008 (0.06C-0.4Mn), con un tamaño de grano austenítico de $27.6 \mu\text{m}$, y se incluyen las curvas de otros investigadores para comparación. Estas curvas son para el mismo tamaño

de grano austenítico, pero para aceros de distinta composición química, excepto la curva de Hodgson [31] que se ha calculado para la misma composición química, la curva de Umemoto [32] es para una composición de 0.15C-0.4Mn, y la de Sellars [28] es para una composición de 0.09C-1.39Mn.

Las curvas divergen para bajas velocidades de enfriamiento, pero a velocidades más altas tienden a converger. Parece ser que la divergencia de las curvas es debido a la composición química de los aceros. Si se calcula el carbono equivalente como se mencionó en la Secc. 2.8 [31] para los distintos aceros, se tiene que como aumente el contenido de aleantes, la curva tenderá a tener un menor tamaño de grano ferrítico a bajas velocidades de enfriamiento.

3.7.5.1.- GENERALIZACION DEL MODELO.

Para generalizar el modelo, primeramente se comprobó que las relaciones entre ϕ_1 y θ_1 se mantienen constantes, aun variando la composición química del acero. Debido a que las tensiones superficiales $\sigma_{\alpha\gamma_1}$ y $\sigma_{\gamma\gamma}$ disminuyen en la misma proporción, cuando aumenta el contenido de carbono (Tabla II, Cap. 2), entonces el ángulo θ entre tensiones superficiales se mantiene constante (Ec. 3.4d), si $\sigma_{\alpha\gamma_2}$ disminuye también en la misma proporción, que es de esperarse. $\sigma_{\alpha\gamma_1}/\sigma_{\gamma\gamma} \approx 0.83$, se mantiene constante con el aumento del contenido de carbono.

Dado que los ϕ_1 y θ_1 se mantienen constantes, la altura del

núcleo crítico para un subenfriamiento de 1°K disminuye con el contenido de carbono en el acero, lo anterior se puede observar desde la ecuación 3.4e, se despeja el termino **1-fact**, el cual incluye a ϕ y θ , y se igualan los terminos despejados a los de otra composición química, de tal manera que:

$$h^*(2) = h^*(1) \frac{\sigma_{\alpha\gamma}(2) L(1) T_{Ae_3}(2)}{\sigma_{\alpha\gamma}(1) L(2) T_{Ae_3}(1)} \quad (3.14)$$

donde los datos con (1) indican propiedades para un acero de más bajo carbono que los de (2), entonces dado que $\sigma_{\alpha\gamma}(2) < \sigma_{\alpha\gamma}(1)$ (Tabla II, Cap. 2) [33], $L(1) < L(2)$ [21,34], y $T_{Ae_3}(2) < T_{Ae_3}(1)$ [36], por lo tanto $h^*(2) < h^*(1)$.

Lo anterior era de esperarse dado que cuando aumenta el contenido de carbono se obtiene ferrita más fina, en menor volumen, hasta que llega a ser plaquetas, en el eutectoide. Hay que recordar que las alturas de los núcleos críticos son para un subenfriamiento de 1°K, y que estas disminuyen con el subenfriamiento, si dejamos la relación entre ϕ y θ fija.

Se tendrá también que encontrar la dependencia de los C_v y L_v con el tamaño de grano austenítico, y si es posible reproducir aceros de distinta composición química pero con el mismo tamaño de grano austenítico, para observar la dependencia de los parámetros con la composición química. En la Tabla III se muestran los aceros que se utilizaron para generalizar el modelo.

TABLA III

ACERO REF. [36]	COMPOSICION QUIMICA	TAMAÑO DE GRANO AUSTENITICO
1008	0.06C-0.43Mn	7 ASTM 27.6 μm
1019	0.17C-0.92Mn	0-2 ASTM 313-156 μm
1021	0.20C-0.81Mn	8-9 ASTM 19.5-13.8 μm
1030	0.30C-0.75Mn	7-8 ASTM 27.6-19.5 μm
1035	0.35C-0.37Mn	75% 2-3, 25% 7-8 ASTM

Después de reproducir su respectivo diagrama TTT (Apéndice V), se obtuvo el tamaño de grano ferrítico en función de la velocidad de enfriamiento para los aceros de la Tabla III, Fig. 21. Se incluyen también las curvas de Umemoto y Sellars para comparación. Las relaciones anteriores se obtuvieron al modificar la fórmula del carbono equivalente a $C.E. = C + Mn/10$. De tal forma que al incrementarse el contenido de carbono equivalente entonces disminuye el tamaño de grano ferrítico, tendiendo a ser independiente de la velocidad de enfriamiento, para aceros con un contenido de C.E. arriba de 0.38.

En las Figs. 22 y 23 se puede observar el comportamiento de los C_v y L_v en función del tamaño de grano austenítico y la composición química. Se observa que la cantidad de sitios posibles para la nucleación por unidad de volumen, aumentan con el contenido de carbono equivalente, y las distribuciones utilizadas para reproducir el TTT son muy similares.

En la Tabla IV se separan a los sitios posibles de nucleación por cm^3 , que fueron necesarios para reproducir la zona ferrítica del diagrama TTT, en esquinas/ cm^3 y sitios/esquina, para encontrar como aumentan estos con la composición química y el tamaño de grano austenítico. Las esquinas por cm^3 para un dado tamaño de grano austenítico, las podemos conocer fácilmente con una tabla de metalografía cuantitativa [37], considerando que los granos tiene su forma termodinámica de equilibrio. De esta manera el parámetro a conocer será la cantidad de sitios por esquina, el cual se verá afectado por la composición química y el tamaño de grano austenítico.

Después de observar la Tabla IV se puede concluir que el tamaño de grano austenítico afectará la cantidad de sitios por esquina, si el tamaño es muy grande, como en el caso del acero 1019. Pero ignorando este, la Tabla nos muestra como la composición química eleva la cantidad de sitios por esquina, para aceros con 10^6 y hasta 10^9 esquinas por cm^3 . En la Fig. 24 se muestra la dependencia de los sitios posibles de nucleación por esquina, con

la composición química, en esta figura se puede observar un crecimiento exponencial de los sitios con la composición química.

TABLA IV

ACERO	T.G.A	Esq./cm ³	Sitios/Esq.	Sitios/cm ³
REF. [36]	ASTM	REF. [37]	Sitios/cm	
1008 C.E.= 0.10	7	10 ⁷ -10 ⁸	10 ¹ -10 ²	10 ⁹
1019 C.E.= 0.26	0-2	10 ⁵ -10 ⁶	10 ⁴ -10 ⁵	10 ¹⁰
1021 C.E.= 0.28	8-9	10 ⁸ -10 ⁹	10 ² -10 ³	10 ¹¹
1030 C.E.= 0.38	7-8	10 ⁷ -10 ⁸	10 ⁵ -10 ⁶	10 ¹³
1035 C.E.= 0.39	75% 2-3, 25% 7-8	10 ⁶ -10 ⁸	10 ⁵ -10 ⁶	10 ¹³

En la Fig. 25 se muestra la dependencia de los sitios posibles de los bordes. En bordes se observó que con tan sólo multiplicar la distribución del 1008 por un factor, dicha distribución serviría para reproducir la zona ferrítica del diagrama TTT de los aceros de la Tabla III, hasta donde el tiempo para el 5% de transformación fue medible, de ahí se puede deducir que lo único que aumenta con la composición química es la cantidad de sitios por cm de borde.

Para el acero 1008 se tomarón los sitios/cm calculados teóricamente, y en la Tabla V se muestra como crecen estos con la composición química,

TABLA V

ACERO	Sitios/cm	
	Teórico REF. [8] $\gamma\text{-Fe } 10^7 \exp(-U_v/KT)$ 850 - 700°C	Encontrado
1008	10^4	10^4
1019	10^4	10^5
1021	10^4	10^6
1030	10^4	10^8
1035	10^4	10^8

En la Fig. 25 se muestra la dependencia de los sitios posibles de nucleación por cm, con la composición química, se puede observar que los sitios crecen exponencialmente con la composición química.

Entonces podemos pensar que es posible reproducir teóricamente la zona ferrítica del diagrama TTT para un acero hipoeutectoide, con un tamaño de grano austenítico desde 2-3 y hasta 9 ASTM, y un

carbono equivalente $C + Mn/10$ entre 0.10 y 0.40, ya que ahora sabemos que las distribuciones de esquinas y bordes se mantendrán casi constantes con el tamaño de grano austenítico, y además tenemos un patron de como varían los sitios posibles de nucleación con la composición química (Figs. 24 y 25).

5.- Obtenga los datos experimentales de σ_{gr} , σ_{gr} y el calor

3.8.- PROCEDIMIENTO PARA REPRODUCIR UN TTT Y CALCULAR EL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO A ENFRIAMIENTO CONTINUO DE UN ACERO DE BAJO CARBONO Y TAMAÑO DE GRANO 2-3 Y HASTA 9 ASTM.

$$\sigma_{gr} = 765 \exp(-0.5244 C.E.) \text{ y } \sigma_{gr} = 671 \exp(-0.6072 C.E.)$$

- 1.- Convierta su composición química a carbono equivalente, $C.E. = \%C + 1/10(\%Mn)$.
- 2.- Seleccione de las Figs. 24 y 25, la cantidad de sitios por esquina (C_{1c}) y los sitios por cm (C_{1e}), para $0.10 < C.E. < 0.40$.
- 3.- Obtenga la cantidad de granos/cm³ para su tamaño de grano austenítico de la tabla del apéndice IV, multipliquela por 6 para de esta manera, obtener la cantidad de esquinas con el ángulo de equilibrio; ahora multiplique esta cantidad por los C_{1c} y por la distribución de la Fig. 26. De esta manera ya se tiene C_v para cada ángulo de esquina.
Multiplique los C_{1e} por la distribución de la Fig. 27.

Así se obtiene los L_v para cada ángulo de borde.

4.- La relación entre ϕ (fi) y θ (teta) para esquinas y

4.1 bordes están dadas por las Figs. 15 y 18; tómesese al

4.2 ángulo Ψ como 18° .

5.- Obtenga los datos experimentales de $\sigma_{\gamma\gamma'}$, $\sigma_{\alpha\gamma}$ y el calor

latente de transformación (L) para su acero. De la

Tabla II, se obtuvieron las siguientes regresiones para

4.2 calcular la energía superficial en función de C.E.:

Para $\sigma_{\gamma\gamma'} = 765 \exp(-0.5244 \text{C.E.})$ y $\sigma_{\alpha\gamma} = 671 \exp(-0.6072 \text{C.E.})$

en mJ/m^2 , el calor latente se obtuvo utilizando los

datos de la Secc. 2.9: $L = 1478 \text{C.E} + 170 \text{ cal/mol}$.

6.- Utilize las Ecs. 3.4a y 3.5a, para calcular las

energías de activación, después utilice las Ecs. 3.1c y

3.1d para calcular las velocidades de nucleación.

7.- Utilize la Ec. 3.9 para calcular la fracción

transformada y hacer su TTT.

8.- Utilize las Ecs. 3.11 y 3.12 para calcular el

tamaño de grano ferrítico. Tomese $T_f = 700^\circ\text{C}$ para

velocidades de enfriamiento menores a 1°C/seg .

CAPITULO 4.

DISCUSION.

4.1.- INTRODUCCION.

En este capítulo se discutirán las suposiciones realizadas, se compararán las predicciones con datos experimentales y se comentarán las restricciones del modelo.

4.2.- CONSIDERACIONES DEL MODELO.

Para reproducir el diagrama de transformación isotérmica y calcular el tamaño de grano ferrítico final se realizaron algunas suposiciones, las cuales se trataran a continuación.

4.2.1.- NUCLEOS DE SUPERFICIE.

Si se realiza un análisis de la energía de activación que tiene que vencer un núcleo de superficie, como lo describe Cahn [5], Fig. 17a, Ec. 2.3, resulta que estos embriones sólo se podrán formar a subenfriamientos muy grandes, pero, sin embargo los datos experimentales [11,24] indican la nucleación en superficie a subenfriamientos menores. En la Secc. 3.7.3.2 se supone que los núcleos de superficie pueden ser un caso especial de aquellos de borde, esto es, embriones con un ángulo grande (mayor a 160°), que se presentan en ondulaciones de la superficie de grano, Fig 17b. Estas ondulaciones en donde se puede nuclear más fácilmente la ferrita, se pueden justificar debido a que el ordenamiento cris-

talino se pierde en la frontera de grano, presentándose una estructura desordenada, en donde hay una gran cantidad de dislocaciones [3,8].

4.2.2.- DISTRIBUCIONES DE ESQUINAS.

Ya se comentó que el modelo de la forma de un núcleo de esquina, se considera que el ángulo entre las tensiones de un sólo grano (ϕ) fuera el mismo Fig. 5, pero en realidad este ángulo puede variar entre cada par de tensiones. Por esta razón, para reproducir el diagrama TTT completamente se necesitan ángulos muy pequeños, aunque este tipo de esquinas no existan, habiendo una equivalencia en su energía de activación igual a la de una esquina donde los ángulos entre las tensiones varían.

Sabemos que cada esquina es compartida por cuatro granos, y si suponemos que un grano tiene un ángulo ϕ pequeño entre tensiones, entonces restringimos a que los otros tres tengan un ángulo promedio mayor. Por lo tanto, al nuclearse el grano de ferrita en una esquina de ángulo pequeño, se debe de tomar en cuenta que la cantidad de sitios para este ángulo están disminuyendo, pero también, para el ángulo promedio de los otros granos de la misma esquina, debido a que el grano crecerá y ocupará todo el volumen de la esquina. Pueden existir en realidad una combinación de ángulos de esquina, o sea que en las cuatro esquinas de grano se tenga distinto ángulo y, por lo tanto, al presentarse un núcleo en una de ellas se tendría que tomar en cuenta el consumo de sitios en cuatro

ángulos, pero, por sencillez del modelo, sólo se considera el consumo para dos: el ángulo en donde se núcleo el grano y el ángulo promedio de los otros tres granos.

4.2.4.- TAMAÑO DE GRANO FERRÍTICO.

La distribución encontrada para reproducir el diagrama TTT, de la manera más completa, puede ser la suma de dos distribuciones normales con el mismo valor promedio ($109^{\circ}28'$, ángulo promedio en esquinas); la primera, incluye el 95% de la población, con una desviación estandar de 1.5° , mientras la segunda, que considera al 5% restante, tiene una desviación de 10° .

4.2.3.- DISTRIBUCION DE BORDES.

La distribución de ángulos de borde que puede reproducir los diagramas TTT no presenta un valor máximo en el ángulo de equilibrio (120°) Fig. 16, debido a que para ángulos mayores al de equilibrio la cantidad de sitios que se necesitan aumentan con el ángulo. Esto se puede explicar en base a que la superficie de grano puede presentar ondulaciones Fig. 17, las cuales presentan una energía de activación similar a la que presentan núcleos de borde de ángulo mayor al de equilibrio.

4.2.5.- ENRIAMIENTO CONTINUO.

Podemos suponer que la distribución que obtuvimos es la suma de dos distribuciones. Una sería simétrica, con un valor máximo en el ángulo de equilibrio y contaría sólo como sitios posibles de nucleación a los ángulos formados por la unión de tres granos. La otra distribución contaría sólo a los ángulos de las supuestas

ondulaciones de la superficie como sitios posibles de nucleación.

4.3.- COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES.

Las suposiciones realizadas nos llevaron a resultados que a

4.2.4.- TAMAÑO DE GRANO FERRITICO.

Para obtener el tamaño de grano ferrítico final se consideró la distancia que creció el núcleo hacia dentro de los granos austeníticos. Dado que las interfases semicoherentes e incoherentes son igualmente móviles a altas temperaturas [43], se considera que el núcleo crece hacia dentro de los granos austeníticos que lo rodean.

Inicialmente se supuso en el modelo que todos los granos nu-

cleados a la misma temperatura tendrán el mismo tamaño, es decir,

no se consideró que los granos se nucleasen a distinto tiempo para una misma temperatura. Posteriormente, se consideró el tiempo para

cada grano nucleado, pero los cambios encontrados en el tamaño de grano final fueron del orden de $0.01\mu\text{m}$, por lo se decidió consi-

derar que los granos nucleados a la misma temperatura tendrán el mismo tamaño.

4.2.5.- ENFRIAMIENTO CONTINUO.

Se supuso que una transformación a enfriamiento continuo puede ser considerada como la suma de pequeños intervalos de tiempo

isotérmicos en sucesivas temperaturas. De esta manera se pueden utilizar las velocidades de nucleación y crecimiento isotérmicas

obtenidas para reproducir la zona ferrítica del diagrama TTT.

4.3.- COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES.

Las suposiciones realizadas nos llevaron a resultados que a continuación compararemos con datos experimentales.

4.3.1.- ANGULO DIHEDRAL θ .

El ángulo dihedral θ en el núcleo de tamaño crítico, cambiará a través del proceso de crecimiento hasta llegar al ángulo de equilibrio que encuentra Gjostein [12]. Este mismo argumento se dió para explicar la diferencia entre el ángulo encontrado experimentalmente [11] y las mediciones de energías superficiales de un precipitado de ferrita en equilibrio con la matriz [12], que pronostican un ángulo mayor al encontrado.

Los núcleos críticos que presentan interfases semicoherentes, irán perdiendo la coherencia debido a su incremento de tamaño. Si un núcleo semicoherente crece, su energía de deformación aumentará con su tamaño, hasta un dado momento en que su energía libre total será menor con una interfase incoherente [3].

4.3.2.- RELACION LARGO-ANCHO DE LOS PRECIPITADOS.

De la suposición de que los núcleos de superficie son embriones de borde de ángulo grande, se deduce que se pueda mantener una razón de largo a ancho constante, aunque se generen a distinta temperatura y tiempo. La razón de largo a ancho que permite a los núcleos originarse en aquellos intervalos de temperatura en donde

pueden reproducir adecuadamente el diagrama TTT, fué 3:1, que es observada experimentalmente [11]. Con respecto a la composición química, se tiene que la altura del núcleo crítico (h^*) disminuye con el aumento del contenido de carbono, por lo tanto Ψ disminuye, y entonces la razón largo a ancho cambiará, pero esta variación es pequeña, y por lo tanto nos permite decir que esta razón se mantendrá constante también con la composición química.

4.3.3.- TAMAÑO DE GRANO FERRITICO.

En la Fig. 20 se muestra la predicción del modelo para el tamaño de grano ferrítico contra la velocidad de enfriamiento, para un acero con 0.06C-0.43Mn, así como las curvas obtenidas experimentalmente por otros investigadores [28,31,32], la curva del modelo se asemeja mucho a aquella de Hodgson [31] a velocidades lentas y rápidas, en tanto que los resultados de Umemoto [32] y Sellars [28] divergen de los del presente modelo sobre todo a velocidades lentas. La explicación de este comportamiento es atribuida a la composición química de los aceros para los que se obtuvieron las curvas, la de Hodgson es para un acero con la misma composición química que el del modelo, la de Umemoto es para un acero con 0.15C-0.4Mn y la de Sellars es para 0.09C-1.39Mn. En esta figura se puede notar la tendencia de que al aumentar la composición química, el tamaño de grano ferrítico disminuye a velocidades lentas, mientras que a mayores velocidades su efecto es menor. Lo anterior se puede observar claramente en la Fig. 21, en donde se obtuvieron curvas para aceros con una mayor composición química.

En la Fig. 21, se aprecia que el tamaño de grano ferrítico es casi independiente de la velocidad de enfriamiento para un contenido de carbono equivalente ($C.E. = \%C + (\%Mn)/10$) mayor de 0.37, lo anterior lo observó Hodgson [31] experimentalmente, pero para un carbono equivalente de 0.35 y definido como $C.E. = \%C + (\%Mn)/6$.

4.3.4.- CINETICA DE TRANSFORMACION.

El diagrama de transformación isotérmica nos indica que para pequeños subenfriamientos en la zona ferrítica, el tiempo para la finalización de la transformación será muy grande, disminuyendo a medida que se incremente el subenfriamiento. Lo anterior se puede explicar de la siguiente manera: A pequeños subenfriamientos sólo se nuclearán granos en aquellos sitios donde la energía de activación (ΔG^*) sea pequeña (esquinas y bordes), mientras que en los demás sitios no habrá nucleación, por lo tanto una vez que se consumen los sitios disponibles a esa temperatura, se acabará la nucleación y la transformación dependerá nada más de la velocidad de crecimiento de los embriones, pero como esta cantidad de sitios es limitada, a menos que se tenga un tamaño de grano austenítico muy pequeño, la velocidad de transformación disminuirá. A subenfriamientos mayores, la energía de activación para nucleación en superficie se reducirá, lo que hará viable la generación de embriones en dichos lugares y, dado que esta cantidad de sitios es grande, la velocidad de transformación para estas temperaturas se incrementará.

Por la razón anterior el cálculo de la fracción transformada no se puede llevar a cabo con la misma ecuación en todo el intervalo de subenfriamiento de un diagrama TTT, de ahí que las ecuaciones que consideran constante a la velocidad de nucleación, no describan correctamente todo el proceso de transformación, pero sí el principio de la misma.

Con lo anterior se explica el por qué algunos investigadores [37] han modificado la ecuación de Avrami [13] y propuesto otras ecuaciones [38,39] para calcular la fracción transformada. En las ecuaciones propuestas existen parámetros que incluyen el efecto del tamaño de grano y el sitio de nucleación: esquinas, bordes y superficies. Sin embargo, la razón que argumentan para modificar la ecuación de Avrami, es que en ella no se toma en cuenta el traslape de los campos lejanos de difusión del carbono, que contribuyen a reducir la velocidad de crecimiento al reducir los gradientes de concentración en la interfase.

Las relaciones experimentales ($F=1-\exp(-kt^n)$), que son de la forma La anterior razón sólo tiene un marcado efecto en la velocidad de crecimiento hacia la finalización de la transformación (ver Secc. 2.4, Ec. 2.7). Sin embargo, es justo este efecto, el que los precipitados choquen unos con otros, el que toma en cuenta la ecuación de Avrami.

El valor de n no coincide con los de las Ecs. 3.8, que son las que A continuación se describirá como afecta el enriquecimiento de carbono en la matriz a la velocidad de crecimiento: para que

disminuya la velocidad de crecimiento, Ec. 2.7, el término $C_\gamma - C_0$, tiene que disminuir, o sea C_0 tiene que tender a C_γ , la concentración de carbono en la matriz debe de aumentar, y esto sólo sucede cuando se traslapan campos de precipitados cercanos, por lo tanto, la velocidad de crecimiento se mantendrá casi constante hasta la finalización de la transformación, en donde los campos de distintos precipitados se traslapan y elevan considerablemente la concentración de carbono en la matriz, reduciendo de este modo la velocidad de crecimiento. encontrado para la ecuación de Avrami sin modificar [40], que es de 1.3.

Hawbolt, Chau y Brimacombe [39] después de realizar experimentos con un acero 1010 concluyeron que la transformación de austenita a ferrita podía ser mejor descrita con una ecuación tipo Avrami, que con las ecuaciones propuestas [38], de lo que se deduce que el efecto de los campos lejanos de difusión está tomado en cuenta en la ecuación de Avrami.

Las relaciones experimentales ($F=1-\exp(-kt^n)$), que son de la forma Avrami, y que describen la fracción transformada para aceros hipoeutectoides, encuentran que n tiene un valor entre 0.9 y 1.3 [39,40,41,42], y que el valor del factor k aumenta cuando disminuye la temperatura.

El valor de n no coincide con los de las Ecs. 3.8, que son las que describen la fracción transformada considerando una velocidad de nucleación constante, teniendo estas un valor de n igual a 2.5.

Lo anterior se debe a que una vez que se consumen los sitios posibles de nucleación, la velocidad de transformación disminuye, al decrecer la velocidad de nucleación, y depende ahora sólo del cambio de volumen de los núcleos. El volumen de un núcleo a un tiempo t está dado por $V = At^{3/2}$, donde el valor de A dependerá del tipo de núcleo, Secc. 3.4.1 y Apéndice III. Entonces aquí se nota que n tendrá un valor de 1.5, cuando la velocidad de transformación sólo dependa del cambio de volumen de los núcleos, y este valor se aproxima bastante bien al encontrado para la ecuación de Avrami sin modificar [40], que es de 1.3.

Por lo tanto, podemos pensar que el valor de n cambiará durante la transformación, al principio tendrá un valor de 2.5, y cuando se consuman los sitios de nucleación caerá a 1.5.

El valor de k está relacionado con la cantidad de sitios posibles de nucleación, que aumentan cuando se incrementa el subenfriamiento, lo anterior se puede observar en la Fig. 15, en la cual se muestra la distribución de los sitios posibles de nucleación en bordes, y que aumentan con el incremento del ángulo de borde.

4.3.5.- SATURACION DE LOS SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

Tal vez lo más relevante del modelo es la consideración del consumo de los sitios posibles de nucleación, por lo que la velocidad en un dado sitio alcanza un valor máximo y después disminuye hasta cero con el tiempo, Fig. 28.

En la Fig. 28 se observa que los sitios que primero se activan y se consumen, son las esquinas, después continúan los bordes y posteriormente los de superficie. En esta misma figura se observa también que la cantidad de granos nucleados en las esquinas (granos acumulados) es aproximadamente de la misma magnitud (10^7) que la cantidad de esquinas disponibles para la nucleación por unidad de volumen.

El factor más importante para el consumo de los sitios posibles de nucleación, es la cantidad de sitios por esquina y por unidad de longitud. Si se escogen estos sitios, de una manera distinta a la que se muestra en las Tablas IV y V, se encontrará que los sitios en borde se consumirán antes que los de esquinas, o que nunca se terminarán los sitios posibles de nucleación. Como lo anterior es físicamente inaceptable, podemos entonces concluir que los datos presentados en dichas Tablas son correctos.

En las Figs. 24 y 25 se puede apreciar como la composición química afecta la cantidad de sitios posibles de nucleación por esquina y por unidad de longitud. La cantidad de sitios aumenta de manera exponencial con la cantidad de carbono equivalente en el acero. El comportamiento anterior se puede deber a que se causa una mayor distorsión en la matriz al aumentar el contenido de carbono, elevándose de esta manera la cantidad de vacancias en ella.

En la Tabla IV se muestra que para un tamaño de grano austenítico grande, se aumenta el contenido de sitios posibles por esquina, esto se puede explicar de la siguiente manera: para obtener un tamaño de grano austenítico grande se necesita austenitizar a altas temperaturas, en donde la cantidad de vacancias es grande, después al bajar el acero a la temperatura de transformación, esta cantidad de vacancias puede quedar retenida. La cantidad de sitios posibles por unidad de longitud, no aumento de la misma manera que en las esquinas, probablemente debido a que en una esquina se involucra un mayor volumen del grano. temperaturas más bajas, lo que traerá como efecto el modificar las distribuciones de bordes.

4.4.- RESTRICCIONES DEL MODELO.

En el Capítulo 3 se mencionó la necesidad de conocer las velocidades de nucleación y crecimiento en función de las características del acero, mismas que podíamos obtener del diagrama de transformación isotérmica. En este diagrama se registran tiempos para el 5% de transformación en un intervalo de temperatura limitado, y su final sucede a un tiempo muy largo. A temperaturas más bajas sólo se registran tiempos para el final de la transformación, es decir, para el inicio de la transformación austenita-perlita. Entonces la cinética de transformación de austenita a ferrita se podrá describir de manera confiable en el intervalo donde el tiempo para el inicio de la transformación está registrado, ya que de ahí obtenemos los sitios posibles de nucleación para el inicio de la transformación, parámetro que es fundamental en nuestro modelo. Por

esta razón, las velocidades de enfriamiento lentas (menores a 1 °C/seg.), son las que entran en este intervalo [15], y fueron las que se utilizaron en el modelo.

5.1.- INTRODUCCION.

En el proceso de laminación en caliente, las velocidades de enfriamiento están entre 4 y 15 °C/seg. por lo que el final de la transformación está a temperaturas más bajas que las que registra el TTT para el inicio de la transformación. Este problema se podrá solucionar extrapolando el comportamiento del inicio de la transformación del diagrama de transformación isotérmica a temperaturas más bajas, lo que traerá como efecto el modificar las distribuciones de bordes.

1.- Es posible reproducir la zona ferrítica de los diagramas

En el modelo sólo se considera ferrita poligonal, ya que la ferrita acicular se formará a velocidades de enfriamiento más altas. Lo anterior se debe a que, según estudios realizados [43], las interfases incoherentes son más móviles a bajas temperaturas, que las interfases semicoherentes, mientras que a altas temperaturas ambas son igualmente móviles. Por lo tanto sólo crecerá la interfase incoherente hacia dentro del grano, y la interfase semicoherente se mantendrá inmóvil en la superficie de grano a bajas temperaturas. Debido también a que el tamaño de núcleo crítico disminuye con el subenfriamiento, este tipo de ferrita es muy fina y, dada la forma de crecimiento, toma la forma acicular.

similares a los de borde pero con un ángulo grande. De esta manera también se garantiza que la energía de activación para

CAPITULO 5.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

5.1.- INTRODUCCION.

En este Capítulo se concluirán las ideas discutidas en el capítulo 4, y se darán recomendaciones para un estudio adicional de la cinética de transformación de austenita a ferrita en enfriamiento continuo.

5.2.- CONCLUSIONES.

- 1.- Es posible reproducir la zona ferrítica de los diagramas de transformación isotérmica, suponiendo ciertas distribuciones de esquinas y bordes de grano como posibles sitios de nucleación y considerando que los sitios en la superficie son ondulaciones.
- 2.- Se puede obtener una razón de largo a ancho de 3:1, en los precipitados de ferrita en la superficie de grano, en forma independiente de la temperatura de transformación, tiempo de la reacción y contenido de carbono del acero, si se supone que la nucleación sucede en ondulaciones de la superficie, siendo estos núcleos similares a los de borde pero con un ángulo grande. De esta manera también se garantiza que la energía de activación para

la nucleación aumenta de manera continua, desde núcleos de esquinas, después en bordes, ondulaciones de superficie y finalmente en superficie plana.

1.- Calcular diagramas de enfriamiento continuo utilizando

3.- La velocidad de transformación depende de las velocidades de nucleación y crecimiento de los granos, pero una vez que se saturan los sitios posibles de nucleación para un dado subenfriamiento, la transformación dependerá solamente de la velocidad de crecimiento de

2.- los núcleos. estudio de como aumentan la cantidad de sitios posibles de nucleación en función de la

4.- Se puede calcular el tamaño de grano ferrítico final para aceros hipoeutectoides, en enfriamiento continuo,

3.- por medio de los mecanismos de nucleación y crecimiento, suponiendo que una transformación a enfriamiento continuo puede ser considerada como la suma de pequeños

4.- intervalos de tiempo isotérmicos en sucesivas temperaturas. De esta manera se pueden utilizar las velocidades de nucleación y crecimiento isotérmicas obtenidas para

reproducir la zona ferrítica del diagrama TTT. Se encontró que el tamaño de grano austenítico y la composición

5.- química afectan la velocidad de nucleación a través de la cantidad de sitios posibles de nucleación por esquina y por unidad de longitud.

5.3.- RECOMENDACIONES.

1. P.S. Shewmon, Transformations in Metal, McCraw-Hill, NY, 1969, 209.

1.- Calcular diagramas de enfriamiento continuo utilizando el modelo propuesto. La fracción transformada en enfriamiento continuo se puede obtener sumando el volumen que crece cada grano en el intervalo de tiempo que esta sometido a cada temperatura.

2. M. Hillert and L.I. Staffansson, Acta Chem. Scand., 24(1970), 3815.

2.- Realizar un estudio de como aumentan la cantidad de sitios posibles de nucleación en función de la deformación.

3. D.A. Porter and A.E. Easterling, Phase Transformations in Metals and Alloys, Van Nostrand Reinhold, NY, 1984, 10, 142, 150, 245.

3.- Analizar el crecimiento de grano ferrítico después de terminar la transformación.

4. W. Roberts, R. Liedfeldt and A. Sandberg, Hot Working and Forming processes, Eds. C.M. Sellars, G.J. Davies, The Metal Society, London, 1969.

4.- Modificar el modelo para aceptar ángulos distintos entre cada par de tensiones para determinar con mayor precisión las distribuciones de esquinas y bordes en la austenita.

5. J.W. Cann, Acta Metall., 4(1956), 449.

5.- Estudiar la transformación de austenita a perlita, y de austenita a bainita, en base en los mecanismos de nucleación y crecimiento.

6. H.I. Aaronson and J.P. Low, Lectures on the Theory of Phase Transformations, Edited by H.I. Aaronson, AIME, 1982, 83.

7. M.E. Fine, Phase Transformations in Condensed Systems, McMillan, NY, 1964.

8. D. Hull, Introduction to dislocations, Pergamon Press, 2nd Edition, 1979.

REFERENCIAS

1. P.G. Shewmon, Transformations in Metal, McGraw-Hill, NY, 1969, 209.
2. M. Hillert and L.I. Staffanson, Acta Chem. Scand., 24(1970), 3618.
3. D.A. Porter and K.E. Easterling, Phase Transformations in Metals and Alloys, Van Nostrand Reinhold, UK, 1984, 10, 142, 155, 265.
4. W. Roberts, H. Lidefelt and A. Sandberg, Hot Working and Forming processes, Eds. C.M. Sellars, G.J. Davies, The Metal Society, London, 1980.
5. J.W. Cahn: Acta Metall., 4(1956), 449.
6. H.I. Aaronson and J.K. Lee, Lectures on the Theory of Phase Transformations, Edited by H.I. Aaronson, AIME, 1982, 83.
7. M.E. Fine, Phase Transformations in Condensed Systems, McMillan, NY, 1964.
8. D. Hull, Introduction to dislocations, Pergamon Press, 2nd Edition, 1979.

20. M. Umemoto: *Mathematical Aspects of Phase Transformations*, 24.
9. C. Zener: *J. Appl. Phys.*, 20(1949), 950.
10. M. Hillert: *Jernkontorets Annaler.*, 141(1957), 757.
336.
11. J.R. Bradley, J.M. Rigsbee and H.I. Aaronson: *Metall.*
22. *Trans.*, 8A(1977), 323.
Treating, 1(1981), 48.
12. N.A. Gjostein, H.A. Domian, H.I. Aaronson and
23. E. Eichen: *Acta Met.*, 14(1966), 1637.
13. M. Avrami: *J. Chem Phys.*, 7(1939), 1103.
HSLA steel, *Metall. Trans.*, 1981.
14. W.A. Johnson and R.F. Mehl: *AIME*, 135(1939), 416.
25. F. Lange: *PL. D. Dynamik & Statik*, 214.
15. E. Scheil: *Arch. Eisenhüttenw.*, 12(1935), 565.
26. M. Umemoto, H. Ohtsuka & H. Imai: *Metall. Trans.*, HSLA.
16. J.H. Hollomon, L.D. Jaffe and M.R. Norton: *AIME*, 167(1946), 419.
984.
27. M. Umemoto, H. Ohtsuka & H. Imai: *Metall. Trans.*, 1981.
17. M. Avrami: *J. Chem. Phys.*, 8(1940), 212.
18. J.W. Cahn: *Acta Metall.*, 4(1956), 572. *Processes*, Eds.
C.M. Balluffi, G. T. *Metall. Society*, London.
19. H.J. Whittaker: Ph. D. Thesis, U. Sheffield, GB, 1973.

20. M. Umemoto: Mathematical Modelling of Hot Rolling of Steel, Ed. S. Yue, CIM, Montreal, 1990, 404.
21. V.F. Zackay and H.I. Aaronson; Interscience publ., 1962 336.
22. M. Umemoto, N. Komatsubara and I. Tamura: J. Heat Treating, 1(1980), 57.
23. G.H. Gulliver: J. Inst. Metals 19(1918), 145.
24. M. Umemoto, Z.H. Guo and I. Tamura, Proc. Int. Conf. of HSLA steel, Beijing, China, 1985.
25. F. Lange: Ph. D. Thesis, U. Michigan, 1978.
26. M. Umemoto, H. Ohtsuka, H. Kato and I. Tamura, HSLA, Eds. D.P. Dunne and T. Chandra, U. Wollongong, 1984.
27. M. Umemoto, H. Ohtsuka and I. Tamura: Thermec 88, 2(1988), 769.
28. C.M. Sellars, Hot Working and Forming Processes, Eds. C.M. Sellars, G.J. Davies, The Metal Society, London, 1980.

37. R.T. De Hoff and F.N. Rhines, "Quantitative Metallography", McGraw-Hill Book Co., New York, 1968.
38. M. Umemoto, N. Nishioka and I. Tamura: Proceedings Int'l Congress on Heat Treatment of Materials, Heat Treatment Shanghai '83, 1983, 5.35.
39. E.B. Hawbolt, B. Chau and J.K. Brimacombe: Mathematical Modelling of Hot Rolling of Steel, Ed. S. Yue, CIM, Montreal, 1990, 424.
40. E.B. Hawbolt, B. Chau and J.K. Brimacombe, Metall. Trans., 16A(1985), 565.
41. M. Umemoto, N. Nishioka and I. Tamura, Journal of Heat Treating, 2(1981), 130.
42. J.G. Cabañas, XIII Simposio Nacional de Siderurgia, Morelia, Michoacan, México, 9.12.
43. H.I. Aaronson, C. Laird and K.K. Kinsman, Phase Transformations, Chapter 8, American Society for Metals, Metals Park, Ohio (1970).

APENDICE I.- ENERGIAS DE ACTIVACION.

I.1.- GRANO NUCLEADO EN UNA ESQUINA.

El cambio de energía libre para un núcleo como el que se muestra en la Fig. 5b, esta dada por [1],

$$\Delta G = -V\Delta G_v + A_{\alpha\gamma 1}\sigma_{\alpha\gamma 1} + A_{\alpha\gamma 2}\sigma_{\alpha\gamma 2} - A_{\gamma\gamma}\sigma_{\gamma\gamma} \quad (I.1)$$

el volumen del núcleo es,

$$V = \frac{\sqrt{2}}{6} h^3 \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \text{factor} \quad (I.2a)$$

donde,

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial h} = 0$$

$$\text{factor} = [\text{Csc}^2\theta + \text{Csc}^2(\pi - \varphi - \theta) - 2\text{Csc}\theta\text{Csc}(\pi - \varphi - \theta)\text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \quad (I.2b)$$

las áreas interfaciales creadas son,

$$A_{\alpha\gamma 1} = \frac{\sqrt{2}}{2} h^2 \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \text{factor} \quad (I.3)$$

donde

$$A_{\alpha\gamma 2} = \frac{3\sqrt{2}}{2} h^2 \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \text{Csc}\theta \quad (I.4)$$

al sustituir esta altura crítica en la Ec. I.1, tenemos que la energía de activación esta dada por

y el área destruida es,

$$A_{\gamma\gamma} = \frac{3\sqrt{2}}{2} h^2 \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{Cos}\varphi] \frac{1}{2} \text{Csc}\theta \quad (I.5)$$

donde

haciendo un balance de tensiones a lo largo de la frontera de grano, Fig. 5c, tenemos que

$$\text{Cos}\theta = \frac{\sigma_{\gamma\gamma} - \sigma_{\alpha\gamma 2}}{\sigma_{\alpha\gamma 1}} \quad (I.6)$$

I.2. GRANO NUCLEADO EN UN NÚCLEO

ahora haciendo, la energía libre por el núcleo que se muestra en la Fig. 6b, esta dada por la Ec.

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial h} = 0$$

y utilizando la Ec. I.6, llegamos a que la altura crítica del núcleo es ;

$$h^* = \frac{2\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G} [1 - \text{fact}] \quad (I.7)$$

donde

$$\text{fact} = \frac{3 \text{Cot}\theta}{\text{factor}} \quad (I.2.3)$$

sustituyendo esta altura crítica en la Ec. I.1, tenemos que la energía de activación esta dada por

$$\Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G_V^2} S(\varphi, \theta) \quad (\text{I.8})$$

donde

$$S(\varphi, \theta) = \frac{\sqrt{2}}{8\pi} \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} [1 - \text{fact}]^3 \text{factor}$$

I.2.- GRANO NUCLEADO EN UN BORDE.

El cambio de energía libre para el núcleo que se muestra en la Fig. 6b, esta dado por la Ec. I.1, aquí el volumen del núcleo será

$$V = \frac{4}{6} h^3 \text{Cot}\psi \text{Sen}\frac{\varphi}{2} \text{Csc}\theta \text{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right) \quad (\text{I.2.1})$$

las áreas interfaciales creadas son,

$$A_{\alpha\gamma 1} = 2h^2 \text{Sen}\left(\frac{\varphi}{2}\right) \text{Csc}\theta \sqrt{\text{Cot}\psi^2 + \text{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right)} \quad (\text{I.2.2})$$

$$A_{\alpha\gamma 2} = 2h^2 \text{Cot}\psi \text{Csc}\theta \text{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right) \quad (\text{I.2.3})$$

y el área destruida es,

$$A_{\gamma\gamma} = 2h^2 \cot\psi \csc\theta \operatorname{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right) \quad (\text{I.2.4})$$

haciendo un balance de tensiones a lo largo de la frontera de donde grano, Fig. 6b, tenemos que,

$$\cos\theta = \frac{\sigma_{\gamma\gamma} - \sigma_{\alpha\gamma 2}}{\sigma_{\alpha\gamma 1}} \quad (\text{I.2.5})$$

ahora haciendo,

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial h} = 0$$

y utilizando la Ec. I.2.5, llegamos a que la altura crítica del núcleo es,

$$h^* = \frac{2\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G_v} \frac{\text{fact1}}{\cot\psi} \quad (\text{I.2.6})$$

donde

$$\text{fact1} = \frac{\sqrt{\cot^2\psi + \operatorname{Sen}^2\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right)}}{\operatorname{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right)} - \frac{\cot\psi \cos\theta}{\operatorname{Sen}\left(\frac{\varphi}{2}\right)}$$

sustituyendo esta altura crítica en la Ec. I.1, tenemos que la energía de activación estará dada por,

$$\Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\sigma_{\alpha\gamma 1}}{\Delta G_V^2} S(\varphi, \theta, \psi) \quad (\text{I.2.7})$$

donde

$$S(\varphi, \theta, \psi) = \frac{1}{2\pi} \tan^2 \psi \operatorname{Sen}\left(\frac{\varphi}{2}\right) \operatorname{Csc} \theta \operatorname{Sen}\left(\frac{\varphi}{2} + \theta\right) [\text{fact1}]^3$$

APENDICE II.- CONSUMO DE SITIOS POSIBLES DE NUCLEACION.

II.1.- FRACCION TRANSFORMADA DE LINEA.

El consumo de borde por unidad de longitud, se puede calcular de la siguiente manera: un grano nucleado en un borde de grano tendrá una velocidad de crecimiento sobre este de $3\alpha t^{1/2}$ (la velocidad de crecimiento normal a la frontera de grano es dada como $\alpha t^{1/2}$ por la Ec. 2.6, en tanto que la velocidad sobre la superficie de grano es 3 veces la velocidad normal a la frontera [11]). Un grano nucleado al inicio de la transformación tendrá una longitud sobre la línea de borde de $6\alpha t^{1/2}$ a un tiempo t después de que comenzó la transformación.

La longitud de borde que tendrá un grano nucleado un tiempo τ después de que comenzó la transformación, será de $6\alpha(t-\tau)^{1/2}$. El número de granos nucleados en un incremento de tiempo $d\tau$ por unidad de longitud es $I_e d\tau$.

De ahí la fracción de línea transformada f_e por unidad de longitud, será la suma de todas las longitudes de los núcleos formados desde el inicio de la transformación ($\tau=0$) hasta $\tau=t$, dada por:

$$f_{ae} = \int_0^t 6\alpha I_e (t-\tau)^{\frac{1}{2}} d\tau = 4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}} \quad (\text{II.1})$$

para cualquier tiempo la ecuación que se utiliza es:

$$F_{ae} = 1 - \exp(-4\alpha I_e t^{\frac{3}{2}}) \quad (\text{II.2})$$

II.2.- FRACCION TRANSFORMADA DE ESQUINA.

La frecuencia de nucleación de esquina por esquina es I_c , al pasar el tiempo sabemos que tan sólo un núcleo ocupará la esquina, entonces el valor de $I_c t$ cuando $t \rightarrow \infty$, tiene que ser uno, por lo tanto, la fracción de esquina transformada estará dado por:

$$F_{ac} = 1 - \exp(-I_c t) \quad (\text{I.2.1})$$

la rapidez con que se consume una esquina, dependerá de la cantidad de sitios posibles de nucleación, C_{1c} .

APENDICE III.- FRACCION TRANSFORMADA.

III.1.- NUCLEACION EN ESQUINAS.

Cuando la nucleación se presenta en esquinas de grano, la fracción de material transformado estará dada de la siguiente manera: el volumen de un grano nucleado en la esquina está dado por la Ec. I.2a, el volumen de un grano a un tiempo t después de que comenzó la transformación es:

$$Vol = \frac{\sqrt{2}}{6} Csc(\pi - \varphi - \theta) [1 - Cos\varphi]^{\frac{1}{2}} factor(\alpha t^{\frac{1}{2}})^3 \quad (III.1)$$

donde **factor** esta dado por la Ec. I.2b, $\alpha t^{1/2}$ es la velocidad de crecimiento normal a la frontera de grano, dada por la Ec. 2.6. Un grano de ferrita nucleado a un tiempo τ después de que comenzó la transformación, tiene un volumen:

$$Vol = \frac{\sqrt{2}}{6} Csc(\pi - \varphi - \theta) [1 - Cos\varphi]^{\frac{1}{2}} factor(\alpha^3 (t - \tau)^{\frac{3}{2}}) \quad (III.2)$$

el número de núcleos que se forman en un incremento de tiempo $d\tau$ es $N_c d\tau$. Entonces, la fracción transformada por unidad de volumen f_c , es la suma de todos los volúmenes de los núcleos formados desde el inicio de la transformación ($\tau=0$) hasta $\tau=t$, dada por:

$$f_c = \frac{\sqrt{2}}{15} Csc(\pi - \varphi - \theta) [1 - Cos\varphi]^{\frac{1}{2}} factor \alpha^3 t^{\frac{5}{2}} \quad (III.3)$$

que, para tiempos finitos, se reduce a:

$$F_c = 1 - \exp\left(-\frac{\sqrt{2}}{15} \text{Csc}(\pi - \varphi - \theta) [1 - \text{Cos}\varphi]^{\frac{1}{2}} \text{factor} \alpha^3 t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (\text{III.4})$$

III.2.- NUCLEACION HOMOGENEA.

El volumen de un grano nucleado en forma homogénea está dado por $4\pi r^3/3$, donde r es el radio del núcleo. El volumen del grano a un tiempo t después de que comenzó la transformación es $4\pi(\alpha t^{1/2})^3/3$, suponiendo que la velocidad de crecimiento del grano es $\alpha t^{1/2}$, dada por la ecuación 2.6. El volumen de un grano nucleado a un tiempo τ después de que comenzó la transformación está dado por $4\pi\alpha^3(t-\tau)^{3/2}/3$. El número de granos que se forman en un incremento de tiempo $d\tau$ es $N_v d\tau$. La fracción transformada por unidad de volumen f_v , será la suma de todos los volúmenes de los núcleos formados desde el inicio de la transformación ($\tau=0$) hasta $\tau=t$, que está dada por:

$$f_v = \frac{8\pi}{15} \alpha^3 N_v t^{\frac{5}{2}} \quad (\text{III.2.1})$$

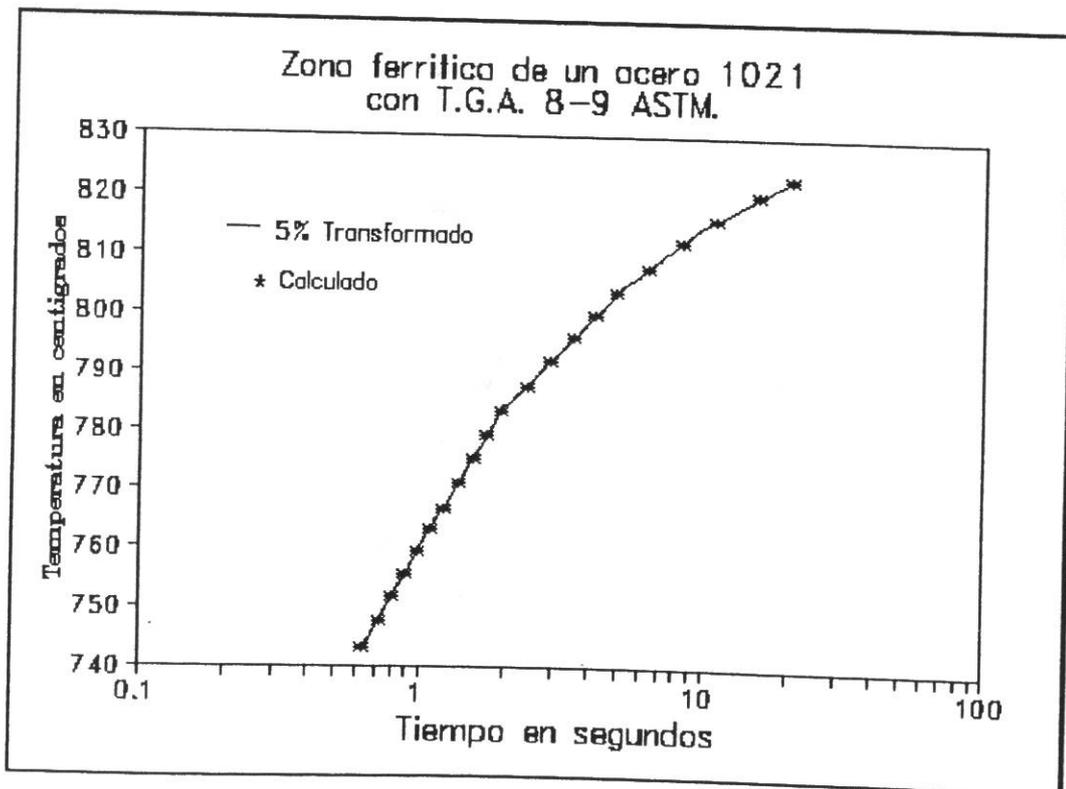
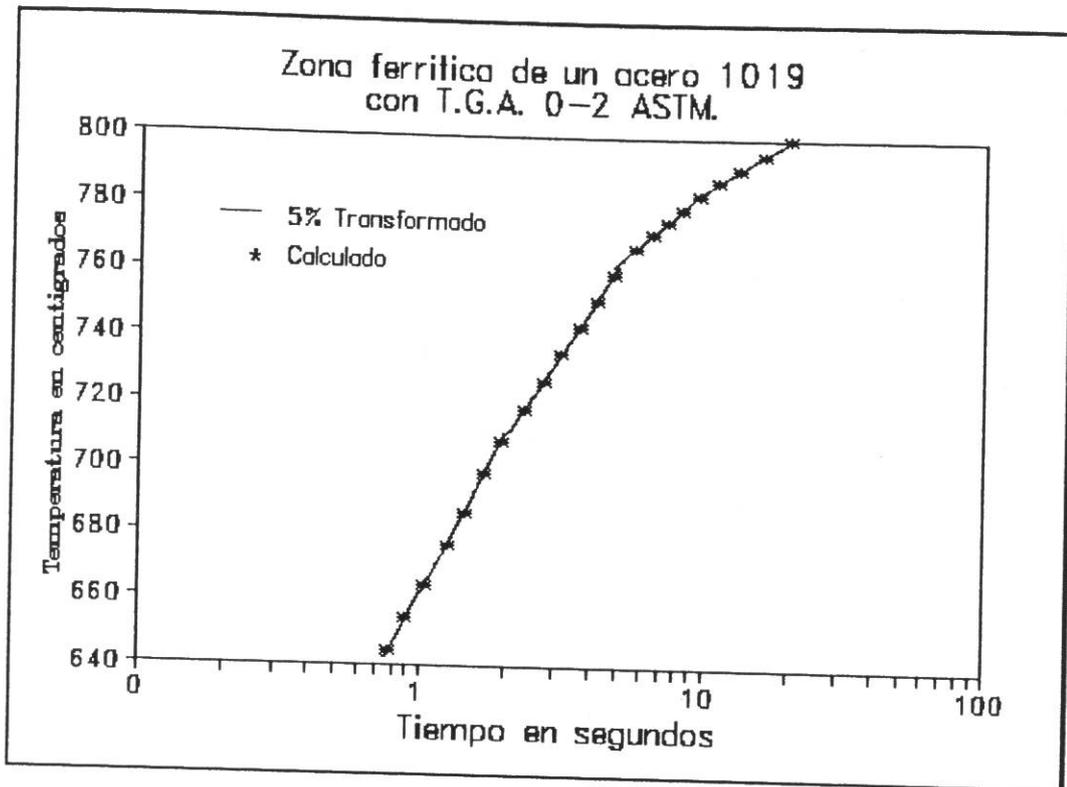
Y para tiempos finitos:

$$F_v = 1 - \exp\left(-\frac{8\pi}{15} \alpha^3 N_v t^{\frac{5}{2}}\right) \quad (\text{III.2.2})$$

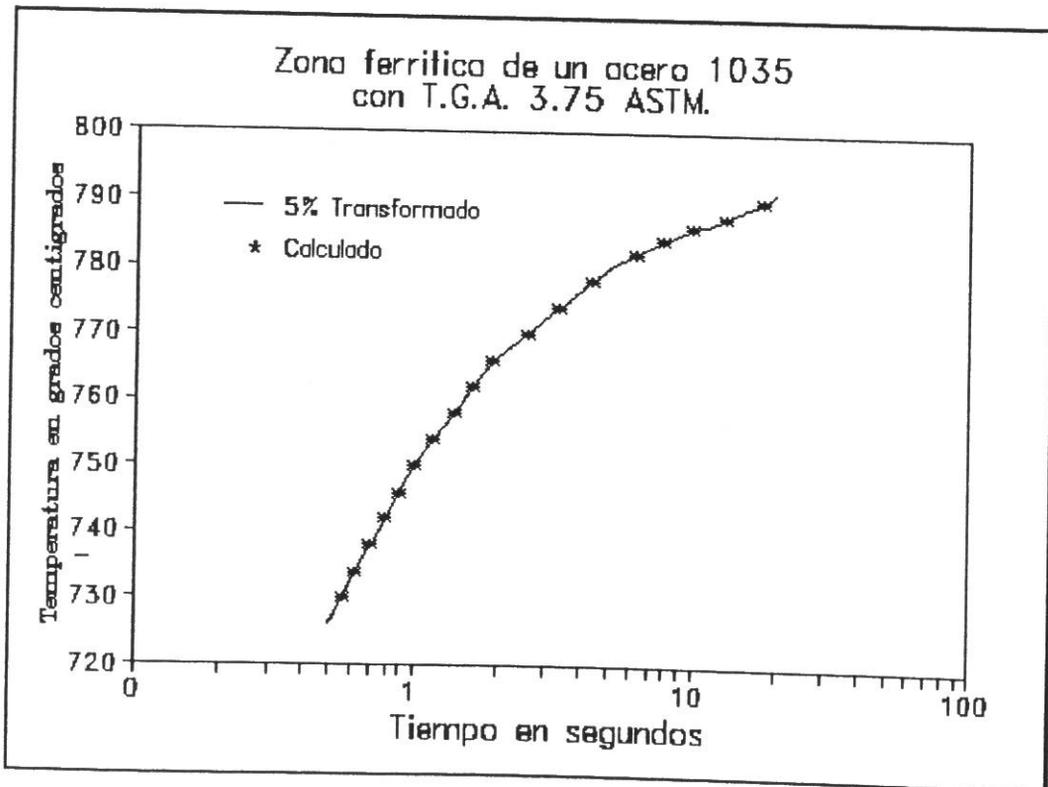
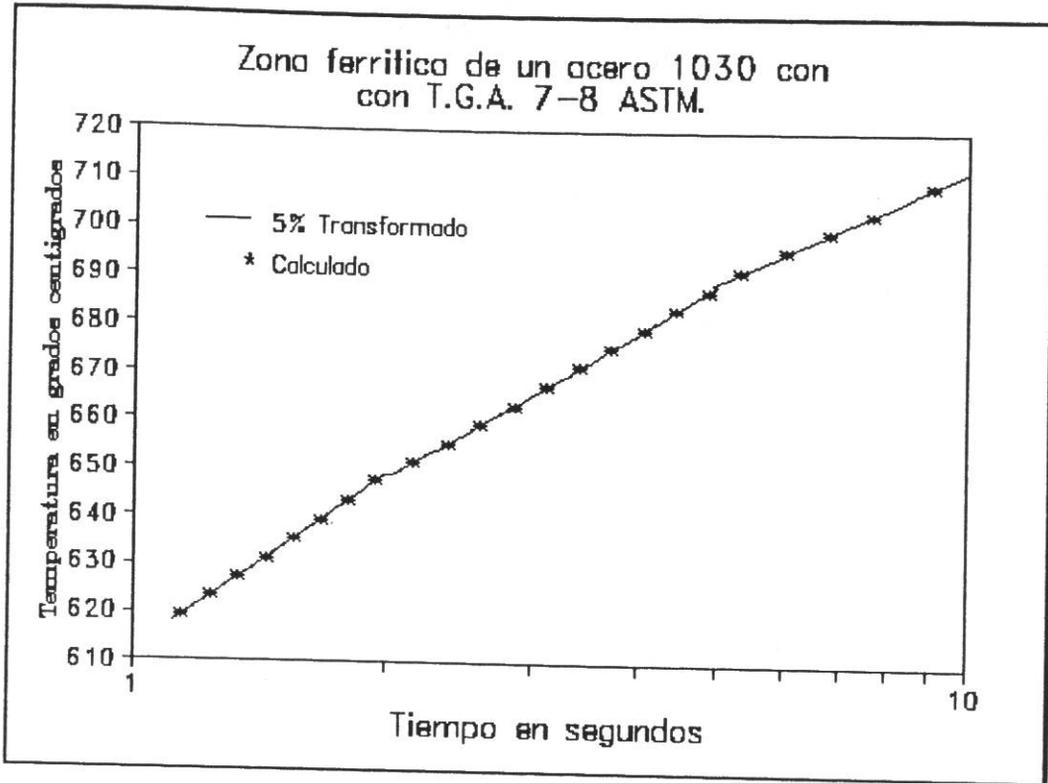
APENDICE IV.- TABLA DE METALOGRAFIA CUANTITATIVA [37]

Número A.S.T.M	granos/mm ² N _A	Diámetro Medio (mm)	granos/mm ³ N _V	mm ² /mm ³ S _V
2	31.00	0.156	112	12.8
2 1/2	43.84	0.131	188	15.2
3	62.00	0.110	316	18.1
3 1/2	87.68	0.0929	531	21.5
4	124.0	0.0781	894	25.6
4 1/2	175.4	0.0657	1500	30.4
5	248	0.0552	2530	36.2
5 1/2	350.7	0.0465	4250	43.1
6	496.0	0.0391	7150	51.2
6 1/2	701.4	0.0328	12000	60.9
7	992.0	0.0276	20200	72.4
7 1/2	1403	0.0232	34000	86.1
8	1984	0.0195	57200	102
8 1/2	2806	0.0164	96200	122
9	3968	0.0138	162000	145

APENDICE V.- DIAGRAMAS TTT.



APENDICE V.- DIAGRAMAS TTT.



APENDICE VI. - PROGRAMAS

PROGRAMA I.- CALCULO DEL ANGULO DIHEDRAL TETA. SUPONIENDO EL ANGULO FI DE ESQUINA. Y ALTURA DE NUCLEO CRITICO PARA UN GRADO KELVIN DE SUBENFRIAMIENTO. SE OBTIENEN TAMBIEN LA ENERGIA DE ACTIVACION Y EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN PARA EL ACERO 1008.

CLS

SUBENFRIAMIENTO; DT

DT(1) = 1

ANGULO FI; Y

Y = 1.91252

ALTURA DEL NUCLEO CRITICO: H=8E-08

VARIACION DEL ANGULO TETA; X

HJ = HJ + .00001

X = 1.48 - HJ

CALCULO DE LA ECUACION 3.4a, 3.4c Y 3.4e

A = SIN(X)

CD = 2 * COS(X)

B = SIN(3.141 - Y - X)

C = COS(Y)

D = TAN(X)

AA = 1 / A

BB = 1 / B

AAA = AA ^ 2

BBB = BB ^ 2

DD = 1 / D

ECUACION 3.4c

FACTOR = (AAA + BBB - 2 * AA * BB * C) ^ .5

FACT = (3 * DD / (FACTOR))

VALOR = 1 - FACT

FACFOR = VALOR ^ 3

CC = (1 - C) ^ .5

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN AL CUADRADO

DG = (DT(1) * (((776 * 4.1) ^ 2) * (1000000! ^ 2))) / ((7.096 ^ 2) * (1113

ECUACION 3.4a

BARR(1) = (.9428 * (.74 / CD) ^ 3 * BB * CC * FACTOR * 6.023E+23 * FACFOR)

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN

DG(1) = DG ^ .5

CALCULO DE LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO, EC. 3.4e

H(1) = 2 * (.74 / CD) * VALOR / (DG ^ .5)

LOCATE 4, 7

PRINT "ALTURA DEL NUCLEO CRITICO"; H(1)

IF H(1) < 8E-08 THEN 27

GOTO 31

```

PRINT "EL VALOR DEL ANGULO TETA ES"; X / .01745
PRINT "EL VALOR DEL ANGULO TETA ES"; X / .01745
PRINT "EL VALOR DE EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE"; DG(1)
PRINT "LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO ES"; H(1)
PRINT "EL SUBENFRIAMIENTO ES DE"; DT(1)
PRINT "ENERGIA DE ACTIVACION"; BARR(1)

```

PROGRAMA II.- CALCULO DEL ANGULO DIHEDRAL TETA, SUPONIENDO EL ANGULO FI DE BORDE, Y LA ALTURA DEL NUCLEO PARA UN GRADO KELVIN DE SUBENFRIAMIENTO. SE OBTIENEN TAMBIEN LA ENERGIA DE ACTIVACION Y EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN PARA EL ACERO 1008.

CLS

```

SUBENFRIAMIENTO; DT
DT(1) = 1

```

```

ANGULO FI; Y
Y = 2.094

```

```

ALTURA DEL NUCLEO CRITICO; H=8E-08

```

```

VARIACION DEL ANGULO TETA; X
HJ = HJ + .0001
X = .698 - HJ

```

```

LOCATE 3, 7
PRINT "ALTURA DEL NUCLEO CRITICO "; H(1)

```

```

CALCULO DE LA ECUACION 3.5a Y 3.5c

```

```

A = COS(X)
CD = 2 * A
C = 1 / SIN(X)
D = SIN((Y / 2) + X)
B = SIN(Y / 2)
OPO = B * C * D

```

```

ECUACION 3.5c

```

```

FACT1 = (((11.2225 + D * D) ^ .5) / D) - 3.35 * A / B)
FACTOR = FACT1 ^ 3

```

```

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN EC. 2.2
DG(1) = (DT(1) * 776 * 4.1 * 1000000) / (1113 * 7.096)
DG = DG(1) ^ 2

```

```

ENERGIA DE ACTIVACION EC. 3.5a

```

```

BARR(1) = .2376 * ((.74 / CD) ^ 3) * B * C * D * FACTOR * 6.023E+23 / DG

```

```

ALTURA DEL NUCLEO CRITICO EC. 3.5e

```

```

H(1) = .597 * (.74 / CD) * FACT1 / DG(1)

```

```

PRINT "EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE ES"; DG(1)
PRINT "EL SUBENFRIAMIENTO ES"; DT(1)
PRINT "EL RADIO DEL NUCLEO CRITICO ES"; H(1)
PRINT "EL VALOR DEL ANGULO (FI) DEL BORDE ES"; Y / .01745
PRINT "EL VALOR DEL ANGULO TETA ES"; X / .01745
PRINT "ENERGIA DE ACTIVACION PARA LA NUCLEACION"; BARR(1)

```

PROGRAMA III.- DETERMINACION DEL ANGULO PSI DE BORDE, QUE VIENE A SER EL ANGULO TETA DEL NUCLEO DE SUPERFICIE COMO LO DESCRIBE CAHN ECUACION 2.3.

POR MEDIO DE LOS PROGRAMAS I,II Y ESTE MISMO, SE SELECCIONA LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO QUE NOS DE UNA ENERGIA DE ACTIVACION QUE DECRESCA DE TAL MANERA QUE LOS NUCLEOS DE ESQUINA SEAN LOS QUE MENORES TENGAN, DESPUES LOS DE BORDE Y FINALMENTE LOS DE SUPERFICIE.

CLS

SUBENFRIAMIENTO: DT
DT(1) = 1

VARIACION DEL ANGULO TETA DE SUPERFICIE O ANGULO PSI DE BORDE; X
HJ = HJ + .00001
X = .3 - HJ

DETERMINACION DE LA ENERGIA DE ACTIVACION Y ALTURA DEL NUCLEO CRITICO

A = COS(X)

FAC = 1 - A

FACTOR = .5 * (2 + A) * ((FAC) ^ 2)

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN

DG(1) = (DT(1) * 776 * 4.1 * 1000000) / (1067.4 * 7.096)

RFT = DG(1)

DG2 = RFT ^ 2

ENERGIA DE ACTIVACION EC. 2.3

BARR(1) = 16.7466 * (.54) ^ 3 * FACTOR * 6.023E+23 / DG2

ALTURA DEL NUCLEO CRITICO

H(1) = 2 * .54 * FAC / DG(1)

LOCATE 6, 7

PRINT "ALTURA DEL NUCLEO CRITICO"; H(1)

IF H(1) < 8E-08 THEN 27

PRINT "EL VALOR DEL ANGULO PSI DE BORDE ES"; X / .01745
PRINT "EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE ES"; DG(1)
PRINT "EL SUBENFRIAMIENTO ES"; DT(1)
PRINT "LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO ES"; H(1)
PRINT "ENERGIA DE ACTIVACION "; BARR(1)

END

PROGRAMA IV.- CALCULO DE LA ENERGIA DE ACTIVACION, LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO Y LA VELOCIDAD DE NUCLEACION EN FUNCION DEL SUBENFRIAMIENTO, PARA UN DADO ANGULO DE ESQUINA (FI) Y SU CORRESPONDIENTE ANGULO DIHEDRAL TETA QUE FUE CALCULADO EN EL PROGRAMA I.

CLS

DIM ESQ(1280), SUBEM(1280), H(1280), DG(1280), BARR(1280), GAM(1280), NUCLE(1280)
DIM DT(1280), NUCTIE(1280), TIEM(1280), NTB(300)
K = 0

ANGULO FI; Y
Y = 2.094

ANGULO TETA; X
X = .68018

GENERACION DEL SUBENFRIAMIENTO AL CUADRADO, DE 0.2 KELVINS EL INTERVALO DE TEMPERATURA; DT
FOR M = 1 TO 255 STEP .2
KE = KE + 1
DT(KE) = M * M
NEXT M

CALCULO DE LA ECUACION 3.4a, 3.4c Y 3.4e

A = SIN(X)
CD = 2 * COS(X)
B = SIN(3.141 - Y - X)
C = COS(Y)
D = TAN(X)
AA = 1 / A
BB = 1 / B
AAA = AA ^ 2
BBB = BB ^ 2
DD = 1 / D

ECUACION 3.4c

FACTOR = (AAA + BBB - 2 * AA * BB * C) ^ .5

FACT = (3 * DD / FACTOR)

VALOR = 1 - FACT

FACFOR = VALOR ^ 3

CC = (1 - C) ^ .5

K = K + 1

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN AL CUADRADO

DG = (DT(K) * (((776 * 4.1) ^ 2) * (1000000! ^ 2))) / ((7.096 ^ 2) * (1113 ^ 2))

ECUACION 3.4a

BARR(K) = (.9428 * (.74 / CD) ^ 3 * BB * CC * FACTOR * 6.023E+23 * FACFOR) /

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE

DG(K) = DG ^ .5

CALCULO DE LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO, EC. 3.4e

H(K) = 2 * (.74 / CD) * VALOR / (DG ^ .5)

SUBENFRIAMIENTO DT

SUBEM(K) = DT(K) ^ .5

LOCATE 6, 7

PRINT " EL VALOR DEL ANGULO DIHEDRAL TETA EN GRADOS"; X / .01745

PRINT "EL VALOR DEL ANGULO FI EN GRADOS"; Y / .01745

PRINT "EL VALOR DE EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE"; DG(K)

PRINT "ALTURA DEL NUCLEO CRITICO ES"; H(K)

PRINT "EL SUBENFRIAMIENTO ES DE"; SUBEM(K)

PRINT "BARRERA DE ACTIVACION"; BARR(K)

IF SUBEM(K) > 200 THEN 2

GOTO 1

CALCULO DE LA VELOCIDAD DE NUCLEACION EN FUNCION DEL SUBENFRIAMIENTO

ECUACION 3.3a

FOR J = 1 TO K

DIF = 32409.639# / (1113 - SUBEM(J))

ACT = BARR(J) / (8.3 * (1113 - SUBEM(J)))

NUCLE(J) = 1E+13 * EXP(-DIF) * 1E+07 * EXP(-ACT) * 3

NEXT J

ARCHIVO PARA LA VELOCIDAD DE NUCLEACION

OPEN "O", #8, "B:ESQ19.DAT"

FOR Y = 1 TO K

WRITE #8, NUCLE(Y)

NEXT Y

CLOSE #8

ARCHIVO PARA LA ENERGIA DE ACTIVACION

OPEN "O", #1, "B:BARE19.DAT"

FOR ER = 1 TO K

WRITE #1, BARR(ER)

NEXT ER

CLOSE #1

ARCHIVO PARA EL SUBENFRIAMIENTO

OPEN "O", #3, "SUB.DAT"

FOR YK = 1 TO K

WRITE #3, SUBDIR TK)
NEXT YK
CLOSE #3

ARCHIVO PARA LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO
OPEN "O", #4, "RADNC.DAT"
FOR LI = 1 TO K
WRITE #4, H(LI)
NEXT LI
CLOSE #4

ARCHIVO PARA EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE
OPEN "O", #5, "ENERLI.DAT"
FOR JI = 1 TO K
WRITE #5, DG(JI)
NEXT JI
CLOSE #5

END

PROGRAMA V.- CALCULO DE LA ENERGIA DE ACTIVACION, LA ALTURA DEL
NUCLEO CRITICO Y LA VELOCIDAD DE NUCLEACION EN FUNCION DEL SUB-
ENFRIAMIENTO. PARA UN DADO ANGULO DE BORDE (FI) Y SU CORRESPONDIENTE
ANGULO DIHEDRAL TETA QUE FUE CALCULADO CON EL PROGRAMA II.

CLS
DIM X(1280), Y(1280), DT(1280), DG(1280), H(1280), BARR(1280), NUCLE(1280)
DIM NUCTIE(1280), TIEM(1280)

GENERACION DEL SUBENFRIAMIENTO AL CUADRADO, DE 0.2 KELVINS EL INTERVALO
DE TEMPERATURA; DT
FOR T = 1 TO 225 STEP .2
TY = TY + 1
DT(TY) = T
NEXT T

ANGULO FI; Y
Y = 2.094

ANGULO TETA; X
X = .5137

CALCULO DE LAS ECUACIONES 3.5a Y 3.5b
A = COS(X)
CD = 2 * A
C = 1 / SIN(X)
D = SIN((Y / 2) + X)
B = SIN(Y / 2)
OPO = B * C * D

1 K = K + 1

ECUACION 3.5c

FACT1 = (((11.2225 + D * D) ^ .5) / D) - 3.35 * A / B)

FACTOR = FACT1 ^ 3

CAMBIO DE ENERGIA LIBRE POR UNIDAD DE VOLUMEN EC. 2.2

DG(K) = (DT(K) * 776 * 4.1 * 1000000) / (1113 * 7.096)

DG = DG(K) ^ 2

ENERGIA DE ACTIVACION EC. 3.5a

BARR(K) = .2376 * ((.74 / CD) ^ 3) * B * C * D * FACTOR * 6.023E+23 / DG

ALTURA DEL NUCLEO CRITICO EC. 3.5e

H(K) = .597 * (.74 / CD) * FACT1 / DG(K)

27 PRINT "EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE ES"; DG(K)
PRINT "EL SUBENFRIAMIENTO ES"; DT(K)
PRINT "LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO ES"; H(K)
PRINT "EL ANGULO FI BORDE ES"; Y / .01745
PRINT "ENERGIA DE ACTIVACION PARA LA NUCLEACION"; BARR(K)
PRINT "EL ANGULO DIHEDRAL TETA ES"; X / .01745
IF DT(K) > 224 THEN 2

GOTO 1

CALCULO DE LA VELOCIDAD DE NUCLEACION EN FUNCION DEL SUBENFRIAMIENTO

ECUACION 3.3c

2 FOR J = 1 TO K

DIF = 32409.639# / (1113 - DT(J))

ACT = BARR(J) / ((1113 - DT(J)) * 8.3)

NUCLE(J) = 1E+13 * EXP(-DIF) * 1E+07 * EXP(-ACT)

NEXT J

ARCHIVO PARA LA ENERGIA DE ACTIVACION

OPEN "O", #1, "B8.DAT"

FOR FG = 1 TO K

WRITE #1, BARR(FG)

NEXT FG

CLOSE #1

ARCHIVO PARA LA VELOCIDAD DE NUCLEACION

OPEN "O", #2, "BOC18.DAT"

FOR TY = 1 TO K

WRITE #2, NUCLE(TY)

NEXT TY

CLOSE #2

ARCHIVO PARA EL CAMBIO DE ENERGIA LIBRE

OPEN "O", #3, "ENLIBO.DAT"

FOR H = 1 TO K

WRITE #3, DG(H)

NEXT H

CLOSE #3

ARCHIVO PARA LA ALTURA DEL NUCLEO CRITICO

OPEN "O", #4, "RAO18.DAT"

FOR J = 1 TO K

WRITE #4, H(J)

NEXT J

CLOSE #4

ARCHIVO PARA EL SUBENFRIAMIENTO

OPEN "O", #5, "SUBBO.DAT"

```
FOR L = 1 TO H  
WRITE #5, DT(L)  
NEXT L  
CLOSE #5
```

END

```
PROGRAMA VI.- REPRODUCCION DEL DIAGRAMA TTT SUPONIENDO DISTRIBUCIONES  
DE ANGULOS DE ESQUINAS Y BORDES, LOS NUCLEOS DE SUPERFICIE SE CONSIDERAN  
UN CASO DE LOS DE BORDE.
```

```
CLS  
DIM fact1(780), FRAC(780), N(780), TIEMPO(780), L(780), T(780), TEMPERA(780)  
DIM T1(780), N1(780), N2(780), N3(780), N4(780), N5(780), N6(780), N7(780), N  
8(780)  
DIM N9(780), N10(780), N11(780), N12(780), N13(780), N14(780), N15(780), N16  
780), N17(780), N18(780)  
DIM N19(780), N20(780), N21(780)  
DIM NB(780), NB1(780), NB2(780), NB3(780), NB4(780), NB5(780), NB6(780), NB7  
780), NB8(780), NB9(780)  
DIM NB10(780), NB11(780), NB12(780), NB13(780), NB14(780), NB15(780), NB16(7  
0)  
DIM NB17(780), NB18(780), NB19(780), NB20(780), NB21(780), NB22(780), NB23(7  
0), NB24(780), NB25(780)  
DIM SNUC(780), NB26(780)
```

```
LECTURA DE LAS VELOCIDADES DE NUCLEACION EN ESQUINAS Y BORDES  
GENERADAS EN LOS PROGRAMAS IV Y V.
```

```
ESQUINAS
```

```
ANGULO FI DE 25 GRADOS  
OPEN "I", #2, "ESQNUC.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #2, N(H)  
NEXT H  
CLOSE #2
```

```
ANGULO FI DE 30 GRADOS  
OPEN "I", #3, "ESQNUC1.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #3, N1(H)  
NEXT H  
CLOSE #3
```

```
ANGULO FI DE 35 GRADOS  
OPEN "I", #4, "ESQNUC2.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #4, N2(H)
```

```
NEXT H  
CLOSE #4
```

```
ANGULO FI DE 40 GRADOS  
OPEN "I", #5, "ESQNUC3.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #5, N3(H)  
NEXT H  
CLOSE #5
```

```
ANGULO FI DE 45 GRADOS  
OPEN "I", #6, "ESQNUC4.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #6, N4(H)  
NEXT H  
CLOSE #6
```

```
ANGULO FI DE 50 GRADOS  
OPEN "I", #7, "ESQNUC5.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #7, N5(H)  
NEXT H  
CLOSE #7
```

```
ANGULO FI DE 55 GRADOS  
OPEN "I", #8, "ESQNUC6.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #8, N6(H)  
NEXT H  
CLOSE #8
```

```
ANGULO FI DE 60 GRADOS  
OPEN "I", #9, "ESQNUC7.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #9, N7(H)  
NEXT H  
CLOSE #9
```

```
ANGULO FI DE 65 GRADOS  
OPEN "I", #10, "ESQNUC8.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #10, N8(H)  
NEXT H  
CLOSE #10
```

```
ANGULO FI DE 70 GRADOS  
OPEN "I", #11, "ESQNUC9.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #11, N9(H)  
NEXT H  
CLOSE #11
```

```
ANGULO FI DE 75 GRADOS  
OPEN "I", #12, "ESQNUC10.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #12, N10(H)  
NEXT H  
CLOSE #12
```

```
ANGULO FI DE 80 GRADOS  
OPEN "I", #13, "ESQNUC11.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #13, N11(H)  
NEXT H  
CLOSE #13
```

```
ANGULO FI DE 85 GRADOS  
OPEN "I", #14, "ESQNUC12.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #14, N12(H)  
NEXT H  
CLOSE #14
```

```
ANGULO FI DE 90 GRADOS  
OPEN "I", #15, "ESQNUC13.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #15, N13(H)  
NEXT H  
CLOSE #15
```

```
ANGULO FI DE 95 GRADOS  
OPEN "I", #16, "ESQNUC14.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #16, N14(H)  
NEXT H  
CLOSE #16
```

```
ANGULO FI DE 100 GRADOS  
OPEN "I", #17, "ESQNUC15.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #17, N15(H)  
NEXT H  
CLOSE #17
```

```
ANGULO FI DE 105 GRADOS  
OPEN "I", #18, "ESQNUC16.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #18, N16(H)  
NEXT H  
CLOSE #18
```

```
ANGULO FI DE 109.6 GRADOS  
OPEN "I", #19, "ESQNUC17.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #19, N17(H)  
NEXT H  
CLOSE #19
```

```
ANGULO FI DE 115 GRADOS  
OPEN "I", #36, "ESQNUC18.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #36, N18(H)  
NEXT H  
CLOSE #36
```

```
ANGULO FI DE 120 GRADOS  
OPEN "I", #37, "ESQNUC19.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #37, N19(H)  
NEXT H  
CLOSE #37
```

```
ANGULO FI DE 125 GRADOS  
OPEN "I", #38, "ESQNUC20.DAT"  
FOR H = 1 TO 780  
INPUT #38, N20(H)  
NEXT H  
CLOSE #38
```

```
ANGULO FI DE 130 GRADOS  
OPEN "I", #39, "ESQNUC21.DAT"  
FOR H = 1 TO 780
```

```
INPUT #39, N21(H)
NEXT H
CLOSE #39
```

```
BORDES
ANGULO FI DE 100 GRADOS
OPEN "I", #20, "BORNUC.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #20, NB(H)
NEXT H
CLOSE #20
```

```
ANGULO FI DE 105 GRADOS
OPEN "I", #21, "BORNUC1.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #21, NB1(H)
NEXT H
CLOSE #21
```

```
ANGULO FI DE 110 GRADOS
OPEN "I", #22, "BORNUC2.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #22, NB2(H)
NEXT H
CLOSE #22
```

```
ANGULO FI DE 115 GRADOS
OPEN "I", #23, "BORNUC3.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #23, NB3(H)
NEXT H
CLOSE #23
```

```
ANGULO FI DE 120 GRADOS
OPEN "I", #24, "BORNUC4.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #24, NB4(H)
NEXT H
CLOSE #24
```

```
ANGULO FI DE 125 GRADOS
OPEN "I", #25, "BORNUC5.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #25, NB5(H)
NEXT H
CLOSE #25
```

```
ANGULO FI DE 130 GRADOS
OPEN "I", #26, "BORNUC6.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #26, NB6(H)
NEXT H
CLOSE #26
```

```
ANGULO FI DE 135 GRADOS
OPEN "I", #27, "BORNUC7.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #27, NB7(H)
NEXT H
CLOSE #27
```

```
ANGULO FI DE 140 GRADOS
OPEN "I", #28, "BORNUC8.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #28, NB8(H)
NEXT H
```

CLOSE #28

ANGULO FI DE 145 GRADOS
OPEN "I", #29, "BORNUC9.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #29, NB9(H)
NEXT H
CLOSE #29

ANGULO FI DE 150 GRADOS
OPEN "I", #30, "BORNUC10.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #30, NB10(H)
NEXT H
CLOSE #30

ANGULO FI DE 155 GRADOS
OPEN "I", #31, "BORNUC11.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #31, NB11(H)
NEXT H
CLOSE #31

ANGULO FI DE 160 GRADOS
OPEN "I", #32, "BORNUC12.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #32, NB12(H)
NEXT H
CLOSE #32

ANGULO FI DE 165 GRADOS
OPEN "I", #33, "BORNUC13.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #33, NB13(H)
NEXT H
CLOSE #33

ANGULO FI DE 170 GRADOS
OPEN "I", #34, "BORNUC14.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #34, NB14(H)
NEXT H
CLOSE #34

ANGULO FI DE 175 GRADOS
OPEN "I", #35, "BORNUC15.DAT"
FOR H = 1 TO 780
INPUT #35, NB15(H)
NEXT H
CLOSE #35

TEMPERATURA DEL INICIO DE LA TRANSFORMACION; T(1)

T(1) = 1113

t2 = 0

K = 0

L = 0

1 K = K + 1

CALCULO DE LA EC. 2.7

CONCENTRACIONES DE CARBONO

C1 = (1183 - T(K)) / 233.75

C2 = (1183 - T(K)) / 7480

COEFICIENTE DE DIFUSION
 $D = .15 * \text{EXP}(- (135000 / (8.3 * T(K))))$

$A1 = (D \wedge .5) * (C1 - C0)$
 $A2 = ((C1 - C2) \wedge .5) * ((C0 - C2) \wedge .5)$
 $A3 = A1 / A2$
 $A = (A3) \wedge 3$

ECUACIONES QUE DESCRIBEN EL DIAGRAMA TTT
T(K) ES LA TEMPERATURA Y T1(K) ES EL TIEMPO

IF T(K) > 1102 THEN GOTO 2
IF T(K) > 1090 THEN GOTO 3
IF T(K) > 1063 THEN GOTO 4
IF T(K) > 1027 THEN GOTO 8
IF T(K) > 961 THEN GOTO 7
GOTO 6
2 T1(K) = (1E+30) * (3E+09) * EXP(-97635.821# / T(K))
GOTO 5
3 T1(K) = (1.25E+29) * EXP(-71300 / T(K))
GOTO 5
4 T1(K) = (5.97E+16) * EXP(-40350.8 / T(K))
GOTO 5
8 T1(K) = (697514801.7#) * EXP(-20909.09 / T(K))
GOTO 5
7 T1(K) = (201920.23#) * EXP(-12545.457# / T(K))
5 T12 = T1(K) ^ 2.5

DISTRIBUCION DE ESQUINAS PROBADA

TKH = .8
TJH = 1
THH = 3
TGH = 6
RZ = 200
QZ = 10
PZ = 7.5
OZ = 5
NZ = 2.6
MZ = 2
KZ = 1
JZ = .8
IZ = .5
LZ = .3
HZ = .15
GZ = .09
FZ = .08
EZ = .075
DZ = .065
CZ = .06
BZ = .05
AZ = .045

VELOCIDADES DE NUCLEACION CON LA DISTRIBUCION PROBADA

$NM = AZ * N(K) + BZ * N1(K) + CZ * N2(K) + DZ * N3(K) + EZ * N4(K) + FZ * N5(K)$
 $NM1 = GZ * N6(K) + HZ * N7(K) + IZ * N8(K) + JZ * N9(K) + KZ * N10(K) + LZ * N11(K)$
 $NM2 = MZ * N12(K) + NZ * N13(K) + OZ * N14(K) + PZ * N15(K) + QZ * N16(K) + RZ * N17(K)$
 $NM3 = TGH * N18(K) + THH * N19(K) + TJH * N20(K) + TKH * N21(K)$
 $NMB = NM + NM1 + NM2 + NM3$

DISTRIBUCION DE BORDES PROBADA

SZ = .1
TZ = 3

```
UZ = 5
VZ = 10
  XZ = 15
YZ = 50
WZ = 100
ZZ = 1500
AEZ = 2400
ASD = 8000
BA = 9000
BB1 = 10000
BC = 100000
BD = 1000000
BE = 23000000
BF = 100000000
```

```
'VELOCIDADES DE NUCLEACION CON LA DISTRIBUCION PROBADA
```

```
BN = SZ * NB(K) + TZ * NB1(K) + UZ * NB2(K) + VZ * NB3(K) + XZ * NB4(K)
BNG = YZ * NB5(K) + WZ * NB6(K) + ZZ * NB7(K) + AEZ * NB8(K) + ASD * NB9(K)
BNGH = BA * NB10(K) + BB1 * NB11(K) + BC * NB12(K) + BD * NB13(K) + BE * NB14(K) + BF * NB15(K) + BG * NB16(K)
YJK = BH1 * NB17(K) + BI1 * NB18(K) + BJ1 * NB19(K) + BK1 * NB20(K) + BL1 * NB21(K) + BM1 * NB22(K) + BN1 * NB23(K) + BO1 * NB24(K) + BP1 * NB25(K) + BQ1 * NB26(K)
```

```
BN1 = BN + BNG + BNGH + YJK
```

```
'SUMA DE LAS VELOCIDADES DE NUCLEACION
```

```
GHJK = NMB + BN1
```

```
'VOLUMEN EXTENDIDO ECUACION 3.8a
```

```
FRAC(K) = 5.024 * A * T12 * GHJK
```

```
L(K) = 5.024 * A * GHJK
```

```
'FRACCION TRANSFORMADA 3.8b
```

```
FRACC = 1 - EXP(-FRAC(K))
```

```
LOCATE 4, 7
```

```
PRINT "FRACCION TRANSFORMADA"; FRACC
```

```
LOCATE 5, 7
```

```
PRINT "TEMPERATURA Y TIEMPO"; T(K), T1(K)
```

```
INPUT "DESEA CONTINUAR"; JKL
```

```
T(K + 1) = T(K) - .2
```

```
IF T(K) < 961 THEN 6
```

```
GOTO 1
```

```
6 'ARCHIVO PARA EL TIEMPO DEL TTT
```

```
OPEN "O", #4, "B:TTTIE.DAT"
```

```
FOR L = 1 TO 650
```

```
WRITE #4, T1(L)
```

```
NEXT L
```

```
CLOSE #4
```

```
'ARCHIVO PARA LA TEMPERATURA DEL TTT
```

```
OPEN "O", #5, "B:TTTEM.DAT"
```

```
FOR P = 1 TO 650
```

```
WRITE #5, T(P) - 273
```

```
NEXT P
```

```
CLOSE #5
```

```
END
```

PROGRAMA VII.- CALCULO DEL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO EN ENFRIAMIENTO
CONTINUO, PARA EL ACERO 1008.
SE NECESITAN LOS ARCHIVOS DE VELOCIDADES DE NUCLEACION DEL PROGRAMA VI.

```
CLS
DIM RFE(780), AJ(780), GRA(780), NUCL(780), FACTOR(780), NUCLBO(780), VEL(7
0) DIM RAD(780), NUCLSU(780), N1(780), N2(780), N3(780), N4(780), N5(780), N6
(780) DIM N7(780), N8(780), N9(780), N10(780), N11(780), N12(780), N13(780), N14(
780), N15(780), N16(780), N17(780)
DIM N18(780), N19(780), N20(780), N21(780), GRANOS(780)
DIM NB1(780), NB2(780), NB3(780), NB4(780), NB5(780), NB6(780), NB7(780), N
88(780) DIM NB9(780), NB10(780), NB11(780), NB12(780), NB13(780), NB14(780), NB15(7
80) DIM VOL(780), TTN(780), TTNB(780), SNUC(780), t1(780)
```

```
INPUT "CUANTAS VELOCIDADES DE ENFRIAMIENTO"; N
FOR PL = 1 TO N
```

```
INPUT "VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO (CENT/SEG.)"; VEL(PL)
NEXT PL
```

```
CLS
```

```
FOR U = 1 TO N
```

```
TEMPERATURA DEL INICIO DE LA TRANSFORMACION: t
t = 1110
```

```
INICIACION DE LOS TIEMPOS DE NUCLEACION EN CERO, PARA LOS DIFERENTES
SITIOS POSIBLES.
```

```
F1 = 0
```

```
t2 = 0: t31 = 0: t33 = 0: t35 = 0: t37 = 0: t39 = 0: t41 = 0: t43 = 0: t45
= 0: t47 = 0: t49 = 0: t51 = 0: t53 = 0: t55 = 0: t57 = 0: t59 = 0: t61 = 0
t4 = 0: t63 = 0: t65 = 0: t67 = 0: t69 = 0: t71 = 0: t73 = 0: t6 = 0: t8 =
0: t10 = 0: t12 = 0: t14 = 0: t16 = 0: t18 = 0: t20 = 0: t22 = 0: t24 = 0: t26 =
0: t28 = 0
t301 = 0: t321 = 0: t331 = 0: t341 = 0: t413 = 0
```

```
INICIACION EN CERO DE ALGUNOS PARAMETROS Y EN UNO EL VALOR DE LAS
INTEGRALES QUE INVOLUCRAN LA FRACCION SIN TRANSFORMAR.
```

```
K = 0: INTB = 1: INTB1 = 1: INTB2 = 1: INTB3 = 1: INTB4 = 1: INTB5 = 1: INT
86 = 1 L = 0: INTB7 = 1: INTB8 = 1: INTB9 = 1: INTB10 = 1: INTB11 = 11: INTB12 = 1
: INTB13 = 1: INTB14 = 1
GRANOS = 0: INTB15 = 1: INTEGLN = 1: INTEGLN1 = 1: INTEGLN2 = 1: INTEGLN3 =
1: INTEGLN4 = 1: INTEGLN5 = 1
RADI = 0: INTSUF = 1: INTEGLN6 = 1: INTEGLN7 = 1: INTEGLN8 = 1: INTEGLN9 =
1: INTEGLN10 = 1: INTEGLN11 = 1: INTEGLN12 = 1
INTEGLN13 = 1: INTEGLN14 = 1: INTEGLN15 = 1: INTEGLN16 = 1: INTEGLN17 = 1:
INTEGLN18 = 1: INTEGLN19 = 1: INTEGLN20 = 1: INTEGLN21 = 1
RADIO = 0
```

```
INTERVALO DE TIEMPO QUE PERMANECE EL MATERIAL EN CADA 0.2 GRADOS
KELVINS DE TEMPERATURA
INTER = .2 / VEL(U)
```

```
1 K = K + 1
```

```
ECUACION 2.7
```

```
C1 = (1183 - t) / 233.75
```

$CO = .08$
 $D = .15 * \text{EXP}(-(135000 / (8.3 * t)))$
 $A1 = (D \wedge .5) * (C1 - CO)$
 $A2 = ((C1 - C2) \wedge .5) * ((CO - C2) \wedge .5)$
 $A3 = A1 / A2$
 $AJ(K) = A3$
 $A = (A3) \wedge 3$

5 $t1 = t2$
 $t1(K) = t1$
 $t2 = t2 + \text{INTER}$
 $\text{DIV} = 100$
 $H = (t2 - t1) / \text{DIV}$

CALCULO DEL TIEMPO QUE UN SITIO DE NUCLEACION LLEVA ACTIVADO

IF NUCL(K) > 0 THEN 511
GOTO 11
511 $t30 = t31$
 $t31 = t31 + \text{INTER}$
IF N1(K) > 0 THEN 512
GOTO 11
512 $t32 = t33$
 $t33 = t33 + \text{INTER}$
IF N2(K) > 0 THEN 513
GOTO 11
513 $t34 = t35$
 $t35 = t35 + \text{INTER}$
IF N3(K) > 0 THEN 514
GOTO 11
514 $t36 = t37$
 $t37 = t37 + \text{INTER}$
IF N4(K) > 0 THEN 515
GOTO 11
515 $t38 = t39$
 $t39 = t39 + \text{INTER}$
IF N5(K) > 0 THEN 516
GOTO 11
516 $t40 = t41$
 $t41 = t41 + \text{INTER}$
IF N6(K) > 0 THEN 517
GOTO 11
517 $t42 = t43$
 $t43 = t43 + \text{INTER}$
IF N7(K) > 0 THEN 518
GOTO 11
518 $t44 = t45$
 $t45 = t45 + \text{INTER}$
IF N8(K) > 0 THEN 519
GOTO 11
519 $t46 = t47$
 $t47 = t47 + \text{INTER}$
IF N9(K) > 0 THEN 520
GOTO 11
520 $t48 = t49$
 $t49 = t49 + \text{INTER}$
IF N10(K) > 0 THEN 521
GOTO 11
521 $t50 = t51$
 $t51 = t51 + \text{INTER}$
IF N11(K) > 0 THEN 522
GOTO 11
522 $t52 = t53$
 $t53 = t53 + \text{INTER}$
IF N12(K) > 0 THEN 523

```

523 t54 = t55
    t55 = t55 + INTER
    IF N13(K) > 0 THEN 524
    GOTO 11
524 t56 = t57
    t57 = t57 + INTER
    IF N14(K) > 0 THEN 525
    GOTO 11
525 t58 = t59
    t59 = t59 + INTER
    IF N15(K) > 0 THEN 526
    GOTO 11
526 t60 = t61
    t61 = t61 + INTER
    IF N16(K) > 0 THEN 527
    GOTO 11
527 t62 = t63
    t63 = t63 + INTER
    IF N17(K) > 0 THEN 528
    GOTO 11
528 t64 = t65
    t65 = t65 + INTER
875 IF N18(K) > 0 THEN 529
    GOTO 11
529 t66 = t67
    t67 = t67 + INTER
876 IF N19(K) > 0 THEN 530
    GOTO 11
530 t68 = t69
    t69 = t69 + INTER
877 IF N20(K) > 0 THEN 531
    GOTO 11
531 t70 = t71
    t71 = t71 + INTER
878 IF N21(K) > 0 THEN 532
    GOTO 11
532 t72 = t73
    t73 = t73 + INTER
11 IF NUCLBO(K) > 0 THEN 51
    GOTO 52
51 t3 = t4
    t4 = t4 + INTER
    IF NB1(K) > 0 THEN 53
    GOTO 52
53 t5 = t6
    t6 = t6 + INTER
    IF NB2(K) > 0 THEN 54
    GOTO 52
54 t7 = t8
    t8 = t8 + INTER
    IF NB3(K) > 0 THEN 55
    GOTO 52
55 t9 = t10
    t10 = t10 + INTER
    IF NB4(K) > 0 THEN 56
    GOTO 52
56 t11 = t12
    t12 = t12 + INTER
755 IF NB5(K) > 0 THEN 57
    GOTO 52
57 t13 = t14
    t14 = t14 + INTER
754 IF NB6(K) > 0 THEN 58
    GOTO 52
58 t15 = t16

```

```

753 IF NB7(K) > 0 THEN 59
      GOTO 52
59   t17 = t18
      t18 = t18 + INTER
752 IF NB8(K) > 0 THEN 60
      GOTO 52
60   t19 = t20
      t20 = t20 + INTER
751 IF NB9(K) > 0 THEN 61
      GOTO 52
61   t21 = t22
      t22 = t22 + INTER
756 IF NB10(K) > 0 THEN 62
      GOTO 52
62   t23 = t24
      t24 = t24 + INTER
757 IF NB11(K) > 0 THEN 63
      GOTO 52
63   t25 = t26
      t26 = t26 + INTER
      IF NB12(K) > 0 THEN 64
        GOTO 52
64   t27 = t28
      t28 = t28 + INTER
      IF NB13(K) > 0 THEN 65
        GOTO 52
65   t29 = t301
      t301 = t301 + INTER
      IF NB14(K) > 0 THEN 66
        GOTO 52
66   t311 = t321
      t321 = t321 + INTER
      IF NB15(K) > 0 THEN 67
        GOTO 52
67   t331 = t341
      t341 = t341 + INTER

80
LOCATE 3, 7
PRINT "GRANOS ACUMULADOS TOTALES"; GRANOS
LOCATE 5, 7
PRINT "TEMPERATURA": t
LOCATE 8, 7
PRINT "NUCLEOS ESQNAS Y BORDES"; TTN, TTNB
PRINT "      NUCLEOS EN SUPERFICIE"; SNUC
LOCATE 6, 7
PRINT "VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO C/S "; VEL(U)

FRACCION DE VACANCIAS
ZC = 8.3 * t
C1E = EXP(-66264 / ZC)
SITIOS POR ESQUINA
C1C = 10
CORRECCION PARA LA VELOCIDAD DE NUCLEACION POR QUE ANTERIORMENTE SE
MULTIPLICO POR ESTE FACTOR
FRP = 1E+07

CALCULO DE LAS INTEGRALES EN LAS ECUACIONES 3.11
IF INTB = 0 THEN 90
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NUCLBO(K) * (t3 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NU
NUCLBO(K) * (t4 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NUCLBO(K) * ((t3 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB = G * H

```

```

90 IF INTB1 = 0 THEN 91
  G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB1(K) * (t5 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB1(K)
) * (t6 ^ 1.5)))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB1(K) * ((t5 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB1 = G * H

91 IF INTB2 = 0 THEN 92
  G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB2(K) * (t7 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB2(K)
) * (t8 ^ 1.5)))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB2(K) * ((t7 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB2 = G * H

92 IF INTB3 = 0 THEN 93
  G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB3(K) * (t9 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB3(K)
) * (t10 ^ 1.5)))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB3(K) * ((t9 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB3 = G * H

93 IF INTB4 = 0 THEN 94
  G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB4(K) * (t11 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB4(K)
) * (t12 ^ 1.5))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB4(K) * ((t11 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB4 = G * H

94 IF INTB5 = 0 THEN 95
  G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB5(K) * (t13 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB5(K)
) * (t14 ^ 1.5))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB5(K) * ((t13 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB5 = G * H

95 IF INTB6 = 0 THEN 96
  G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB6(K) * (t15 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB6(K)
) * (t16 ^ 1.5))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB6(K) * ((t15 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB6 = G * H

96 IF INTB7 = 0 THEN 97
  G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB7(K) * (t17 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB7(K)
) * (t18 ^ 1.5))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB7(K) * ((t17 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB7 = G * H

97 IF INTB8 = 0 THEN 98
  G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB8(K) * (t19 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB8(K)
) * (t20 ^ 1.5))
  FOR U1 = 1 TO DIV - 1
  G = G + EXP(-ANL * C1E * NB8(K) * ((t19 + U1 * H) ^ 1.5))
  NEXT U1
  INTB8 = G * H

98 IF INTB9 = 0 THEN 99

```

```

* (t22 ^ 1.5)))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB9(K) * ((t21 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB9 = G * H

99 IF INTB10 = 0 THEN 100
G = .5 * (EXP(-ANL * C1E * NB10(K) * (t23 ^ 1.5)) + EXP(-ANL * C1E * NB10(K)
) * (t24 ^ 1.5)))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB10(K) * ((t23 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB10 = G * H

100 IF INTB11 = 0 THEN 101
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB11(K) * (t25 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB1
1(K) * (t26 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB11(K) * ((t25 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB11 = G * H

101 IF INTB12 = 0 THEN 102
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB12(K) * (t27 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB1
2(K) * (t28 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB12(K) * ((t27 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB12 = G * H

102 IF INTB13 = 0 THEN 103
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB13(K) * (t29 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB1
3(K) * (t301 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB13(K) * ((t29 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB13 = G * H

103 IF INTB14 = 0 THEN 104
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB14(K) * (t311 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB
14(K) * (t321 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB14(K) * ((t311 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB14 = G * H

104 IF INTB15 = 0 THEN 105
G = .5 * (EXP(-(ANL * C1E * NB15(K) * (t331 ^ 1.5))) + EXP(-(ANL * C1E * NB
15(K) * (t341 ^ 1.5))))
FOR U1 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-ANL * C1E * NB15(K) * ((t331 + U1 * H) ^ 1.5))
NEXT U1
INTB15 = G * H

105 IF INTEGLN = 0 THEN 107
G = .5 * (EXP(-(C1C * (NUCL(K) / FRP) * t30)) + EXP(-(C1C * (NUCL(K) / FRP)
* t31)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (NUCL(K) / FRP) * (t30 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN = G * H

107 IF INTEGLN1 = 0 THEN 108
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N1(K) / FRP) * t32)) + EXP(-(C1C * (N1(K) / FRP) * t
33)))

```

```

G = G + EXP(-C1C * (N1(K) / FRP) * (t32 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN1 = G * H

108 IF INTEGLN2 = 0 THEN 109
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N2(K) / FRP) * t34)) + EXP(-(C1C * (N2(K) / FRP) * t
35)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N2(K) / FRP) * (t34 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN2 = G * H

109 IF INTEGLN3 = 0 THEN 110
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N3(K) / FRP) * t36)) + EXP(-(C1C * (N3(K) / FRP) * t
37)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N3(K) / FRP) * (t36 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN3 = G * H

110 IF INTEGLN4 = 0 THEN 111
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N4(K) / FRP) * t38)) + EXP(-(C1C * (N4(K) / FRP) * t
39)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N4(K) / FRP) * (t38 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN4 = G * H

111 IF INTEGLN5 = 0 THEN 112
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N5(K) / FRP) * t40)) + EXP(-(C1C * (N5(K) / FRP) * t
41)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N5(K) / FRP) * (t40 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN5 = G * H

112 IF INTEGLN6 = 0 THEN 113
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N6(K) / FRP) * t42)) + EXP(-(C1C * (N6(K) / FRP) * t
43)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N6(K) / FRP) * (t42 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN6 = G * H

113 IF INTEGLN7 = 0 THEN 114
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N7(K) / FRP) * t44)) + EXP(-(C1C * (N7(K) / FRP) * t
45)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N7(K) / FRP) * (t44 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN7 = G * H

114 IF INTEGLN8 = 0 THEN 115
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N8(K) / FRP) * t46)) + EXP(-(C1C * (N8(K) / FRP) * t
47)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N8(K) / FRP) * (t46 + U11 * H))
NEXT U11
INTEGLN8 = G * H

115 IF INTEGLN9 = 0 THEN 116
G = .5 * (EXP(-(C1C * (N9(K) / FRP) * t48)) + EXP(-(C1C * (N9(K) / FRP) * t
49)))
FOR U11 = 1 TO DIV - 1
G = G + EXP(-C1C * (N9(K) / FRP) * (t48 + U11 * H))

```

INTEGLN9 = G * H

116 IF INTEGLN10 = 0 THEN 117

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N10(K) / FRP) * t50)) + EXP(-(C1C * (N10(K) / FRP) * t51)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N10(K) / FRP) * (t50 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN10 = G * H

117 IF INTEGLN11 = 0 THEN 118

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N11(K) / FRP) * t52)) + EXP(-(C1C * (N11(K) / FRP) * t53)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N11(K) / FRP) * (t52 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN11 = G * H

118 IF INTEGLN12 = 0 THEN 119

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N12(K) / FRP) * t54)) + EXP(-(C1C * (N12(K) / FRP) * t55)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N12(K) / FRP) * (t54 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN12 = G * H

119 IF INTEGLN13 = 0 THEN 120

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N13(K) / FRP) * t56)) + EXP(-(C1C * (N13(K) / FRP) * t57)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N13(K) / FRP) * (t56 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN13 = G * H

120 IF INTEGLN14 = 0 THEN 121

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N14(K) / FRP) * t58)) + EXP(-(C1C * (N14(K) / FRP) * t59)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N14(K) / FRP) * (t58 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN14 = G * H

121 IF INTEGLN15 = 0 THEN 122

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N15(K) / FRP) * t60)) + EXP(-(C1C * (N15(K) / FRP) * t61)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N15(K) / FRP) * (t60 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN15 = G * H

122 IF INTEGLN16 = 0 THEN 123

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N16(K) / FRP) * t62)) + EXP(-(C1C * (N16(K) / FRP) * t63)))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N16(K) / FRP) * (t62 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN16 = G * H

123 IF INTEGLN17 = 0 THEN 124

G = .5 * (EXP(-(C1C * (N17(K) / FRP) * t64)) + EXP(-C1C * (N17(K) / FRP) * t65))

FOR U11 = 1 TO DIV - 1

G = G + EXP(-C1C * (N17(K) / FRP) * (t64 + U11 * H))

NEXT U11

INTEGLN17 = G * H

```

124 IF INTEGLN18 = 0 THEN 126
    G = .5 * (EXP(-C1C * (N18(K) / FRP) * t66)) + EXP(-C1C * (N18(K) / FRP) *
167))
    FOR U11 = 1 TO DIV - 1
    G = G + EXP(-C1C * (N18(K) / FRP) * (t66 + U11 * H))
    NEXT U11
    INTEGLN18 = G * H

126 IF INTEGLN19 = 0 THEN 127
    G = .5 * (EXP(-C1C * (N19(K) / FRP) * t68) + EXP(-C1C * (N19(K) / FRP) * t6
9))
    FOR U11 = 1 TO DIV - 1
    G = G + EXP(-C1C * (N19(K) / FRP) * (t68 + U11 * H))
    NEXT U11
    INTEGLN19 = G * H

127 IF INTEGLN20 = 0 THEN 128
    G = .5 * (EXP(-C1C * (N20(K) / FRP) * t70) + EXP(-C1C * (N20(K) / FRP) * t7
1))
    FOR U11 = 1 TO DIV - 1
    G = G + EXP(-C1C * (N20(K) / FRP) * (t70 + U11 * H))
    NEXT U11
    INTEGLN20 = G * H

128 IF INTEGLN21 = 0 THEN 129
    G = .5 * (EXP(-C1C * (N21(K) / FRP) * t72) + EXP(-C1C * (N21(K) / FRP) * t7
3))
    FOR U11 = 1 TO DIV - 1
    G = G + EXP(-C1C * (N21(K) / FRP) * (t72 + U11 * H))
    NEXT U11
    INTEGLN21 = G * H

```

SUMA DE LOS GRANOS EN LAS ESQUINAS

```

129 NUES = NUCL(K) * INTEGLN * .045 + N1(K) * INTEGLN1 * .05 + N2(K) * INTEGLN2
* .055 + N3(K) * INTEGLN3 * .08
    NUES1 = INTEGLN4 * N4(K) * .12 + INTEGLN5 * N5(K) * .15 + INTEGLN6 * N6(K)
* .2
    NUES2 = INTEGLN7 * N7(K) * .25 + INTEGLN8 * N8(K) * .35 + INTEGLN9 * N9(K)
* .4
    NUES3 = INTEGLN10 * N10(K) * .7 + INTEGLN11 * N11(K) * 1 + INTEGLN12 * N12(
K) * 2
    NUES4 = INTEGLN13 * N13(K) * 2.6 + INTEGLN14 * N14(K) * 5 + INTEGLN15 * N15
(K) * 7.5 + INTEGLN16 * N16(K) * 10 + INTEGLN17 * N17(K) * 200
    NUES5 = INTEGLN18 * N18(K) * 6 + INTEGLN19 * N19(K) * 3 + INTEGLN20 * N20(K
) * 1 + INTEGLN21 * N21(K) * .8
    TTN = NUES + NUES1 + NUES2 + NUES3 + NUES4 + NUES5
    TTN(K) = TTN

```

SUMA DE LOS GRANOS EN BORDES

```

    NUBO = NUCLBO(K) * .1 * INTB + NB1(K) * 3 * INTB1 + NB2(K) * 5 * INTB2 + NB
3(K) * 10 * INTB3
    NUBO1 = NB4(K) * 15 * INTB4 + NB5(K) * 50 * INTB5 + NB6(K) * 100 * INTB6 +
NB7(K) * INTB7 * 1500
    NUBO2 = NB8(K) * 2400 * INTB8 + NB9(K) * 8000 * INTB9 + NB10(K) * 9000 * IN
TB10
    NUBO23 = NB12(K) * 100000 * INTB12 + NB11(K) * 10000 * INTB11
    NUBO3 = NB13(K) * 1000000 * INTB13 + NB14(K) * 23000000 * INTB14 + NB15(K)
* 100000000 * INTB15
    TTNB = NUBO + NUBO1 + NUBO2
    TTNB(K) = TTNB

```

GRANOS CONSIDERADOS COMO DE SUPERFICIE

```

SNUC = NUBO3 + NUBO23
SNUC(K) = SNUC

```

GRANOS = GRANOS + TTN + TTNB + SNUC
GRANOS(K) = GRANOS

GRANOS PRODUCIDOS A CADA TEMPERATURA
GRA(K) = TTN + TTNB + SNUC

TEMPERATURA DEL FINAL DE LA TRANSFORMACION
IF t < 980 THEN 6
t = t - .2
GOTO 1

CALCULO DEL TAMAÑO DE GRANO FERRITICO

6 FOR NM = 1 TO K
RFE(NM) = 0
NEXT NM

RUTINA PARA CALCULAR EL RADIO DE LA FERRITA AL CUADRADO, QUE FUE
NUCLEADA A LA TEMPERATURA J Y CALCULADA A LA TEMPERATURA K, EC. 2.13
FOR M = 1 TO K
L = L + 1
FOR J = L TO K
XD = AJ(J) * AJ(J)
RFE(M) = RFE(M) + XD * INTER
NEXT J
NEXT M

TAMAÑO DE GRANO PROMEDIO, EC. 3.12a Y 3.12b
FOR L = 1 TO K
RSD = RFE(L)
RSDJ = (RSD) ^ .5
RADI = RADI + (2 * RSDJ * GRA(L)) / GRANOS
NEXT L

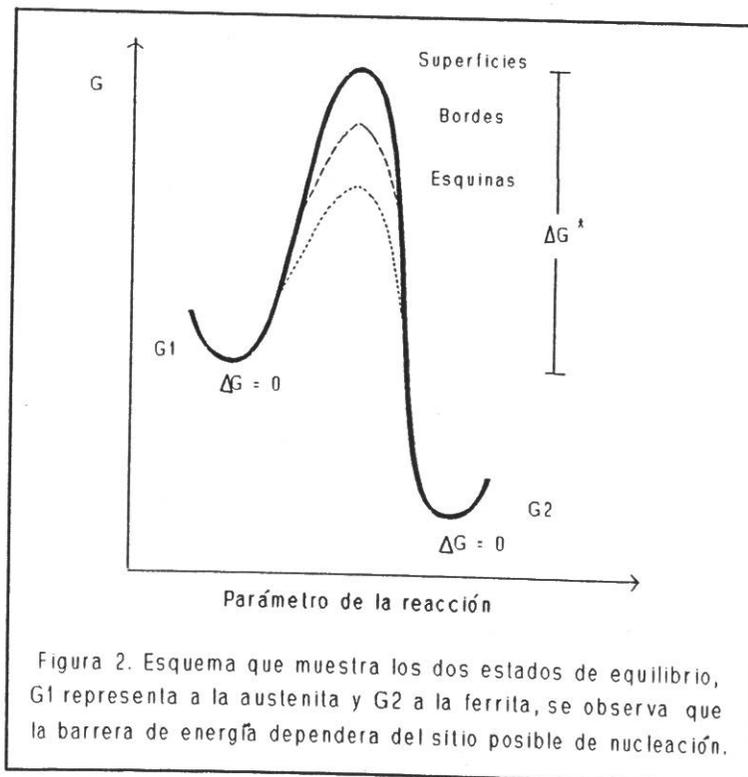
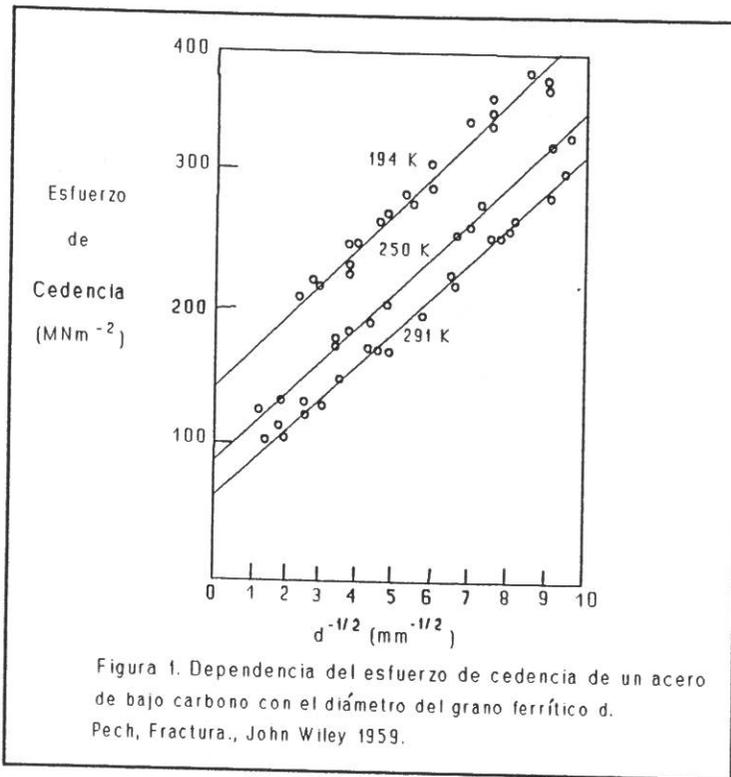
FOR Z = 1 TO 116
RSD = RFE(Z)
RSDJ = (RSD) ^ .5
RADIO = RADIO + (2 * RSDJ * GRA(Z)) / GRANOS
NEXT Z
TGESQ = (RADIO / 100)
RADI(U) = TGESQ

IF K > 116 THEN 12
LOCATE 11, 7
PRINT "TAMAÑO DE GRANO PROMEDIO "; TGESQ, t
PRINT " VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO"; VEL(U), K
GOTO 13

12 FOR J = 116 TO 672
RSD = RFE(J)
RSDJ = RSD ^ .5
RADIO = RADIO + (2 * RSDJ * GRA(J)) / GRANOS
NEXT J
TGFBOR = (RADIO / 100)
RADI(U) = TGFBOR

47 LOCATE 11, 7
PRINT "TAMAÑO DE GRANO PROMEDIO "; TGFBOR, t
PRINT " VELOCIDAD DE ENFRIAMIENTO"; VEL(U), K
13 NEXT U

END



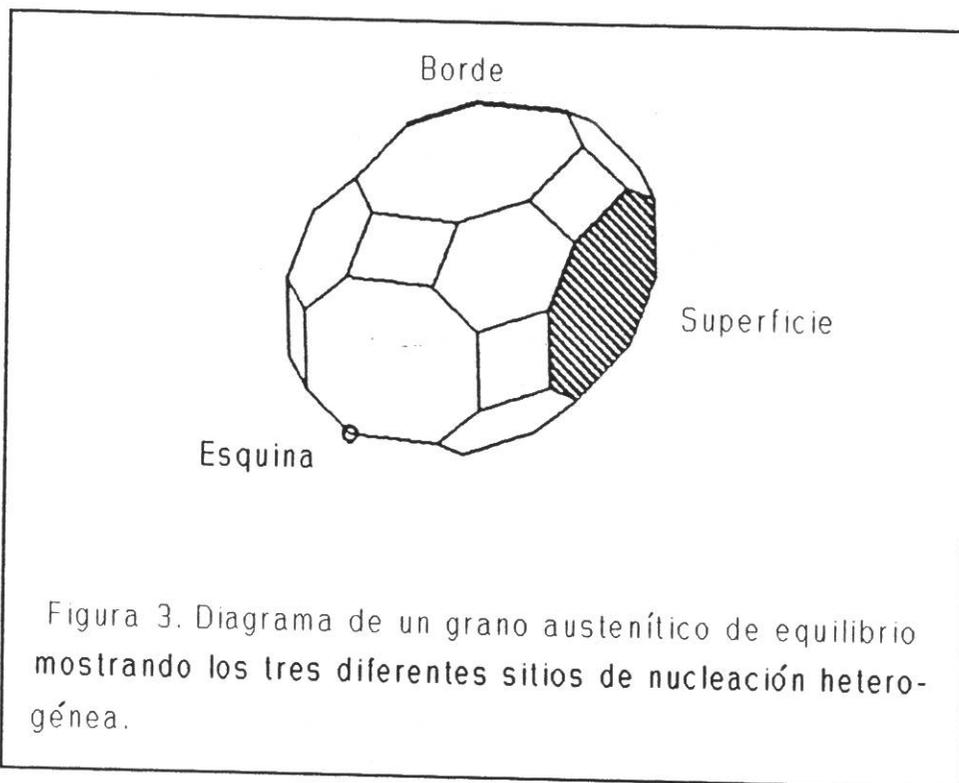


Figura 3. Diagrama de un grano austenítico de equilibrio mostrando los tres diferentes sitios de nucleación heterogénea.

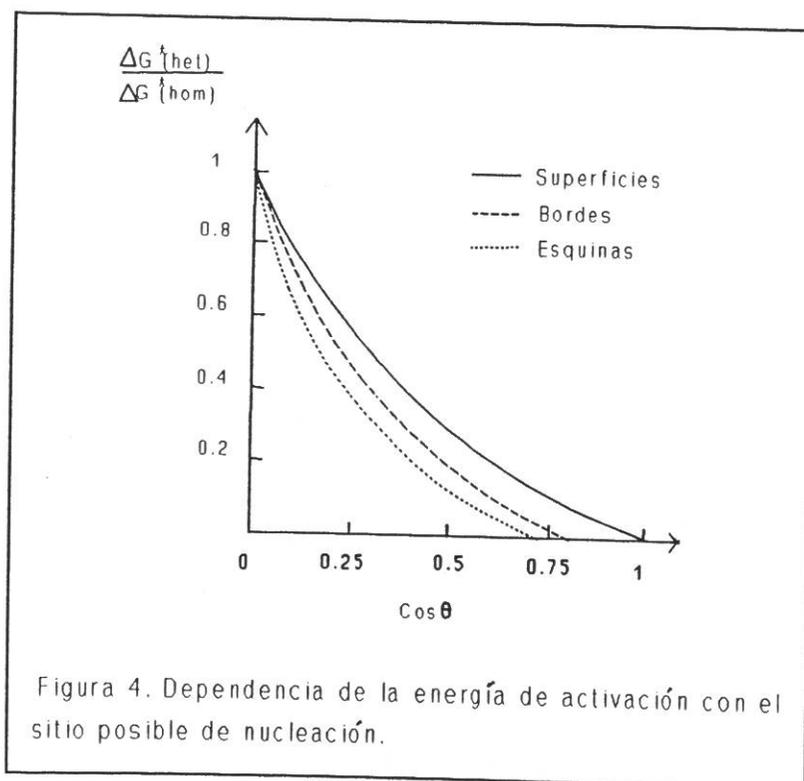
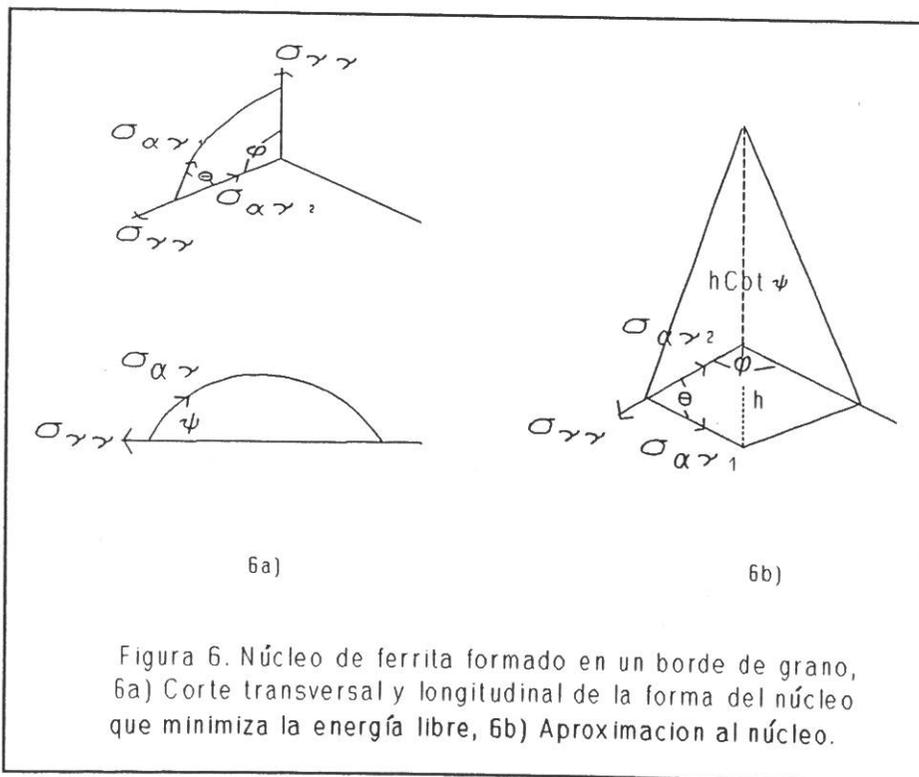
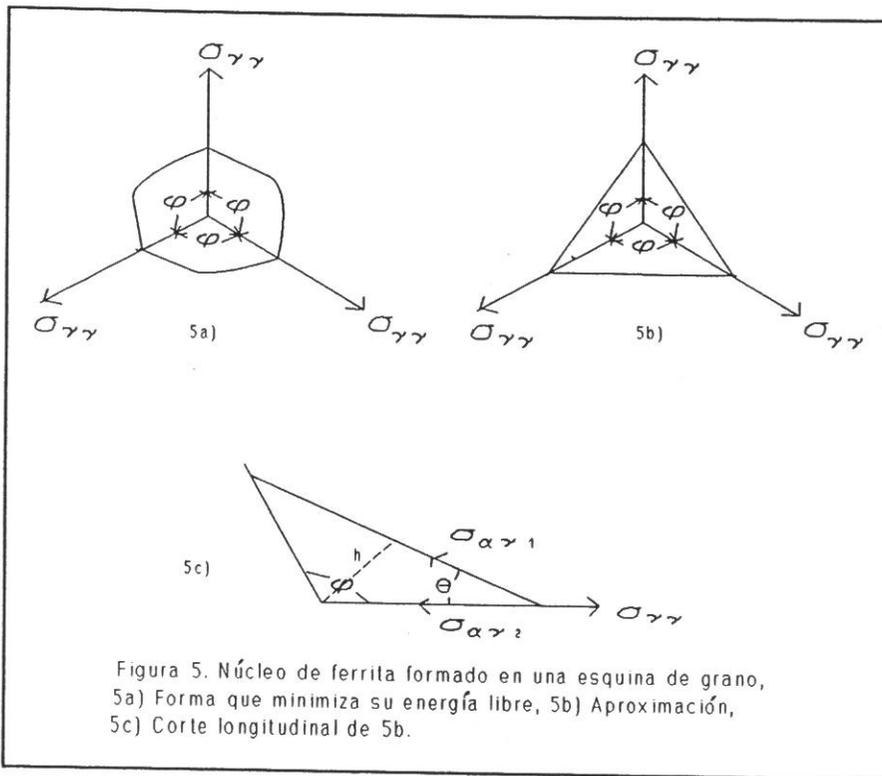
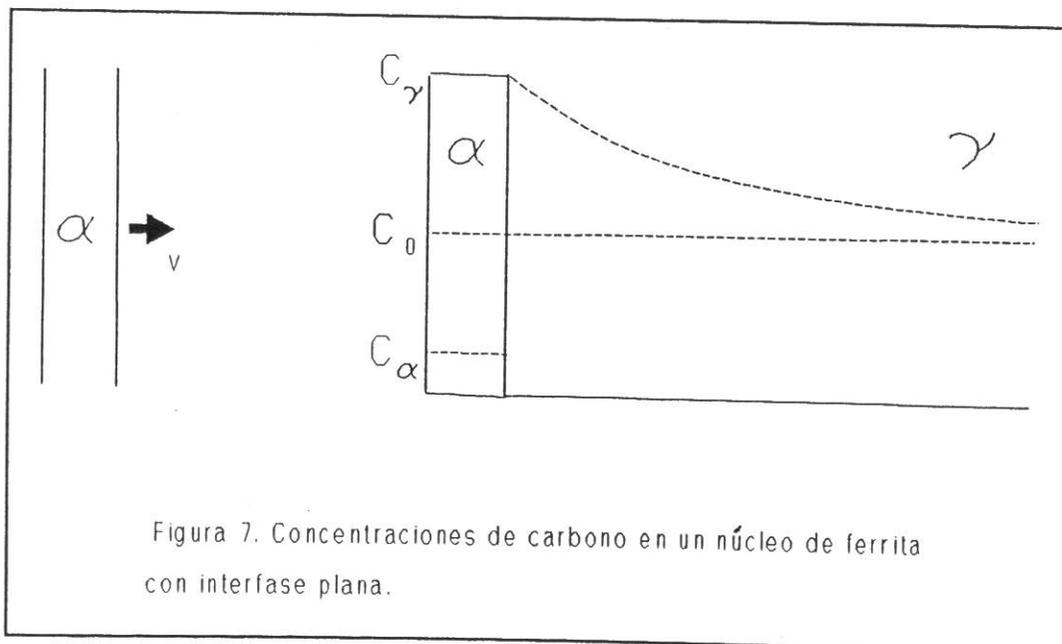
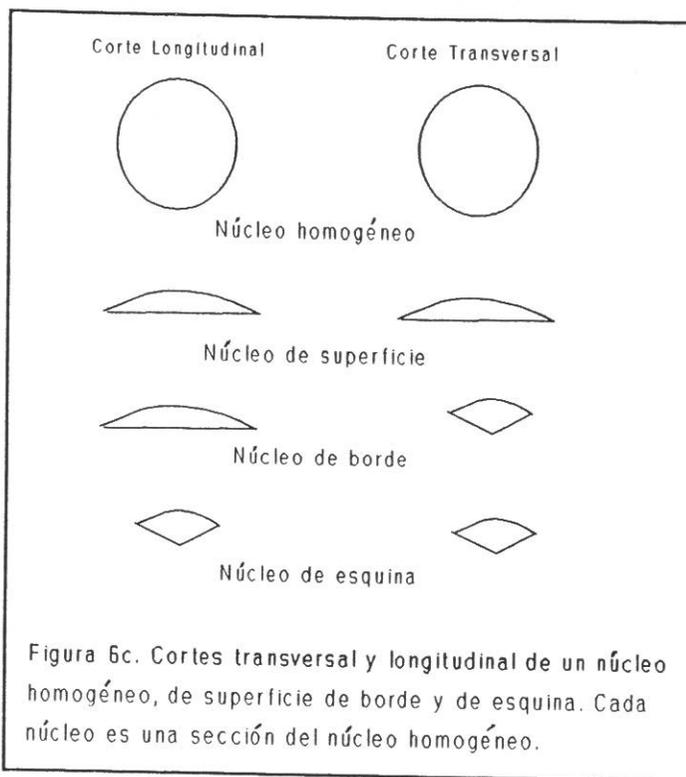


Figura 4. Dependencia de la energía de activación con el sitio posible de nucleación.





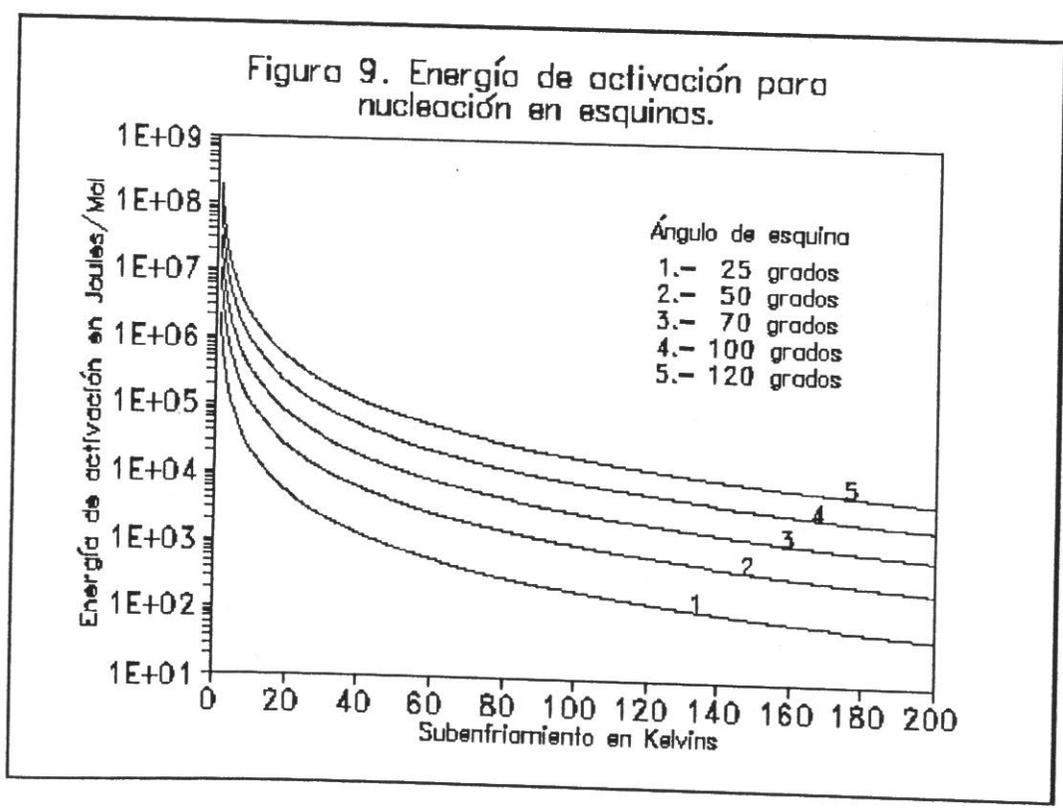
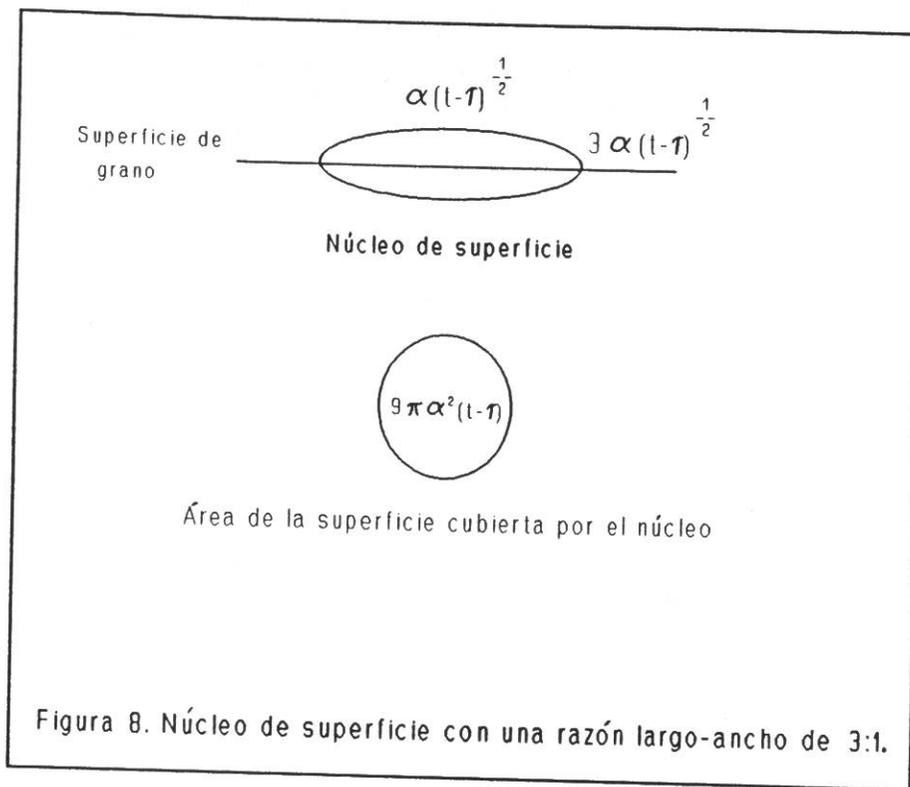


Figura 10. Energía de activación para nucleación en bordes.

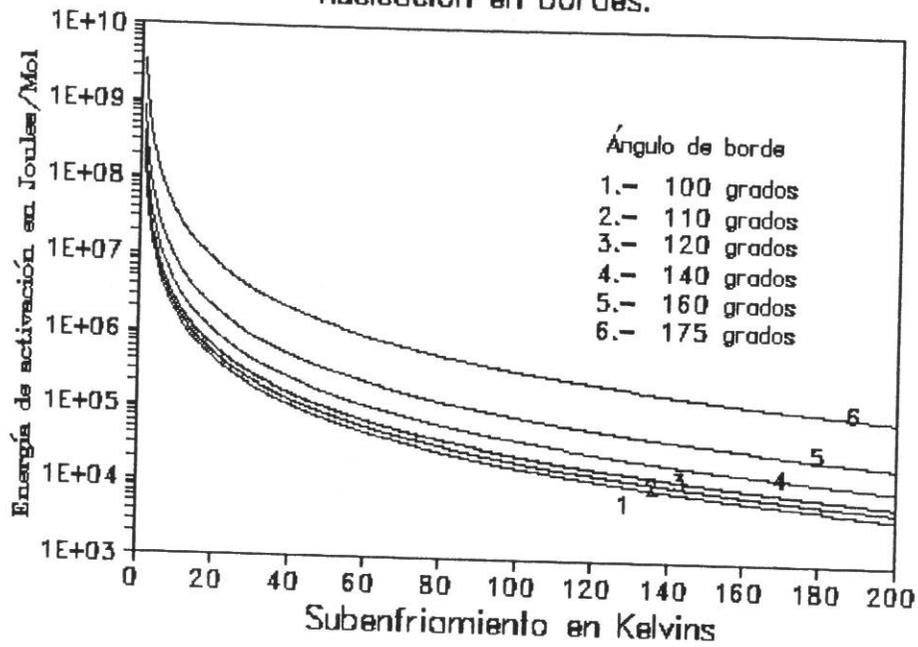


Figura 11. Velocidad de nucleación en esquinas.

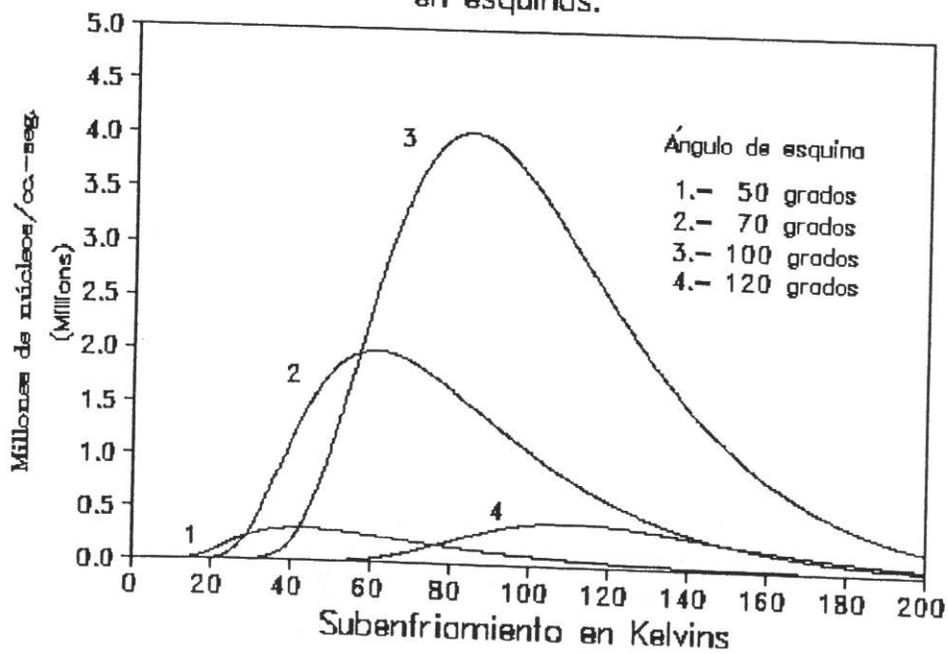


Figura 12. Velocidad de nucleación en bordes.

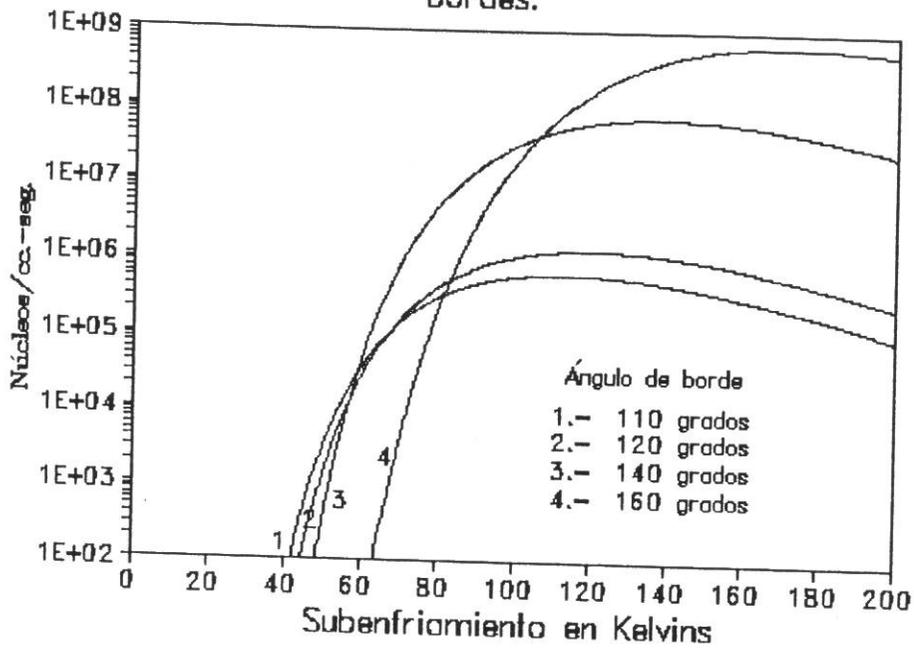


Figura 13. Altura del núcleo crítico.

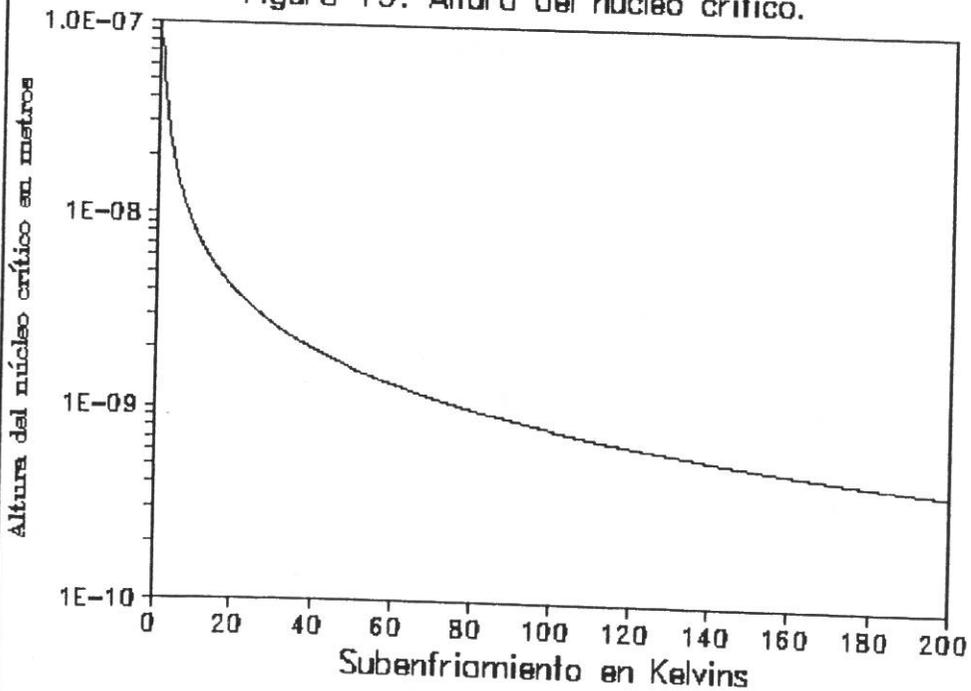


Figura 14. Distribución de ángulos de esquinas, sitios posibles de nucleación.

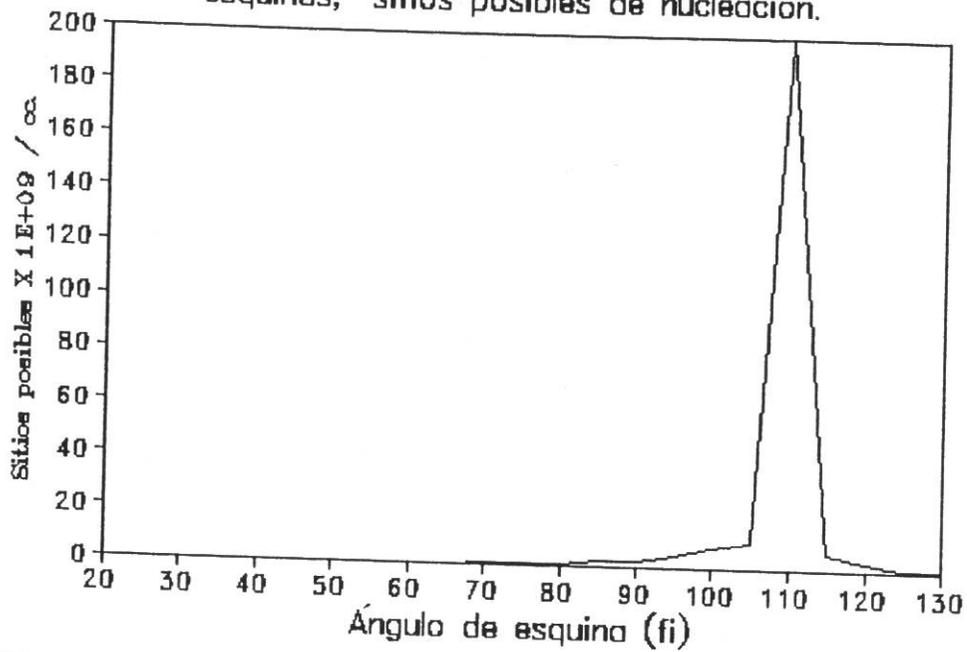


Figura 15. Relacion entre ángulo de esquina (fi) y ángulo dihedral (teta).

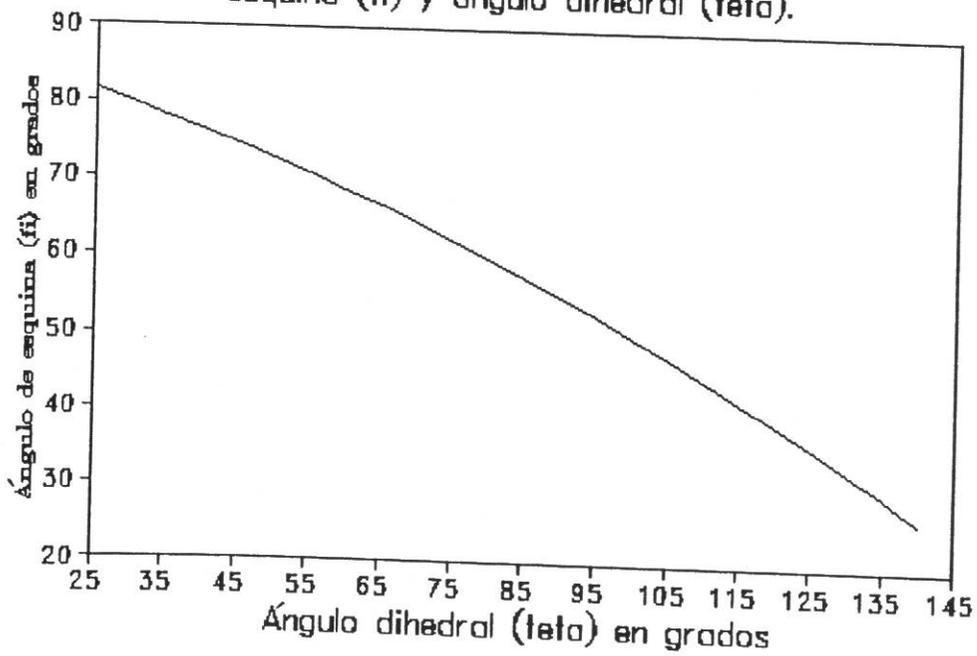


Figura 16. Distribución de ángulos de borde.

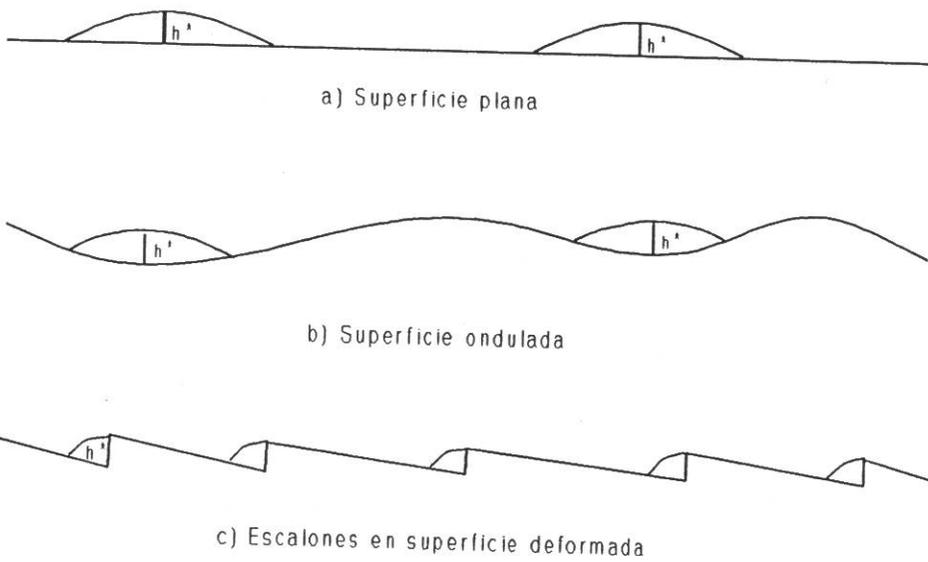
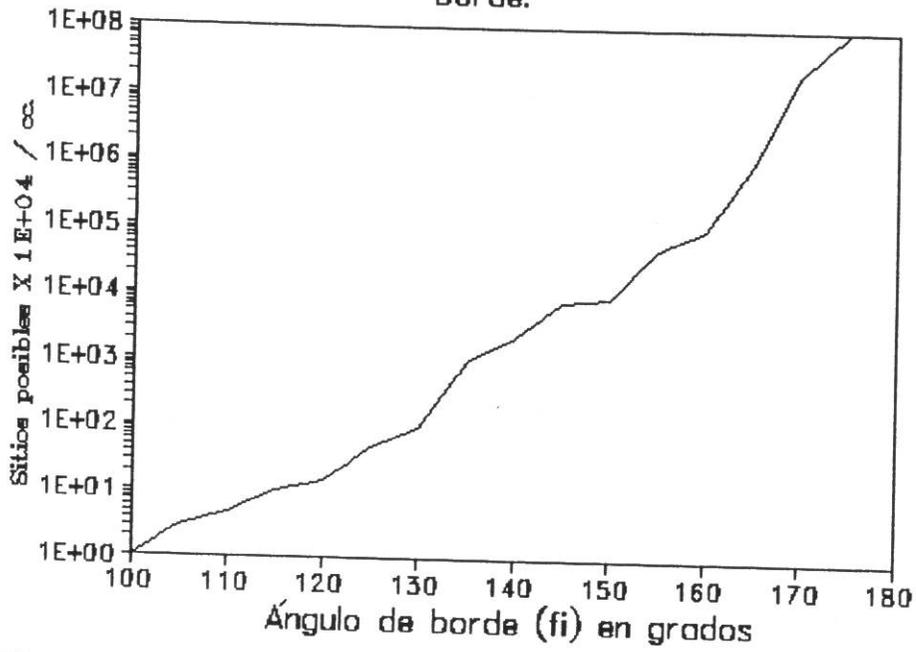


Figura 17. Distintas formas en que se puede presentar la superficie de grano austenítico.

Figura 18. Relación entre ángulo de borde (ϕ) y ángulo dihedral (θ).

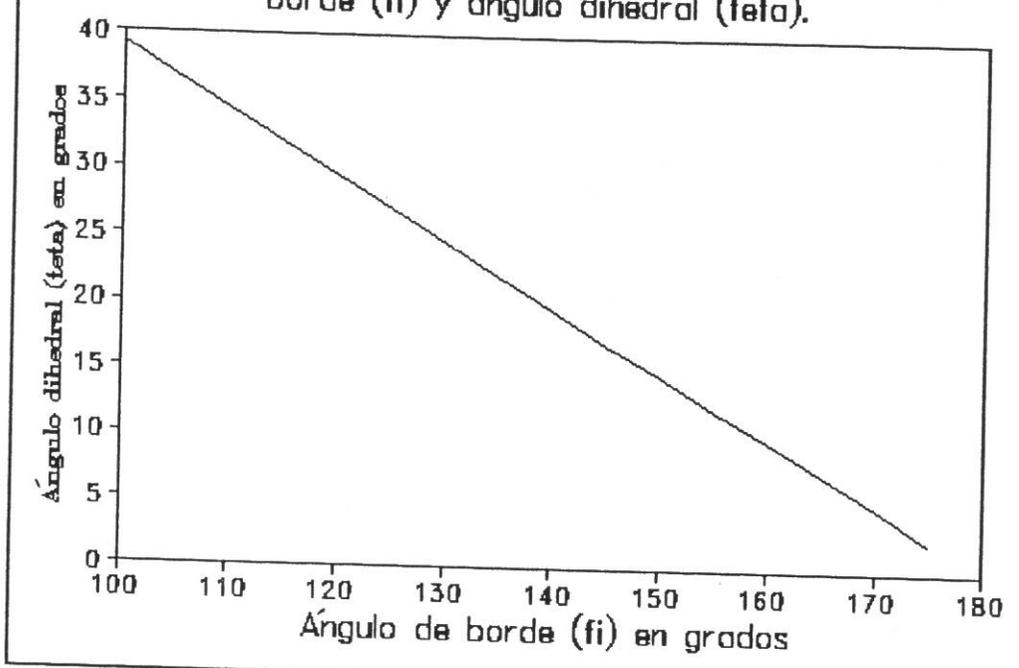


Figura 19. Zona ferrítica del TTT de un acero 1008. T.G.A. 7 ASTM.

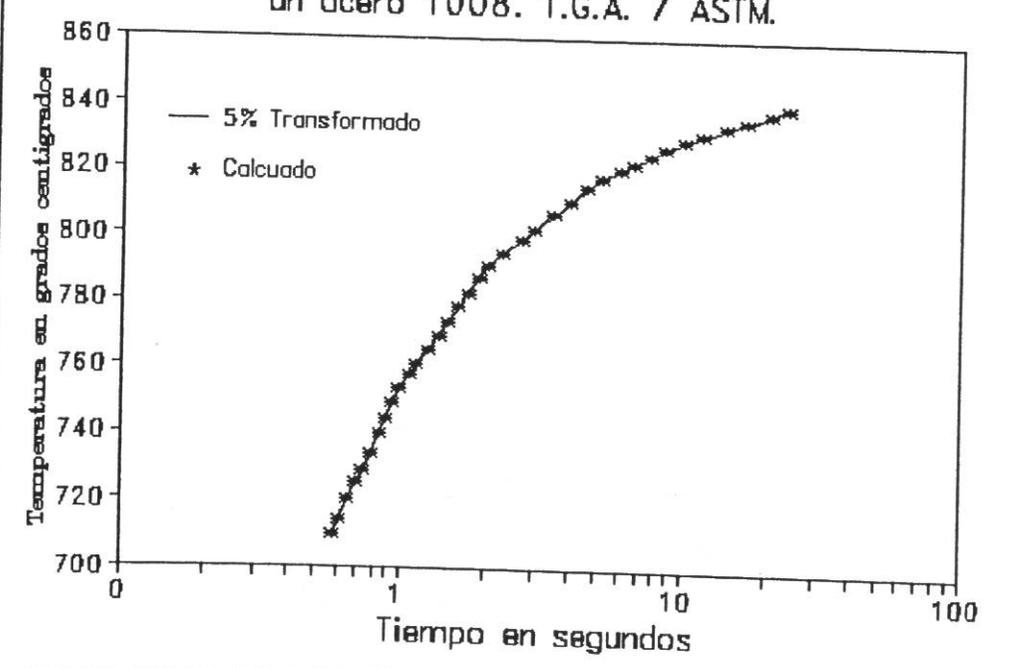


Figura 20. Tamaño de grano ferrítico de un 1008 con T.G.A. de 27.6 micras.

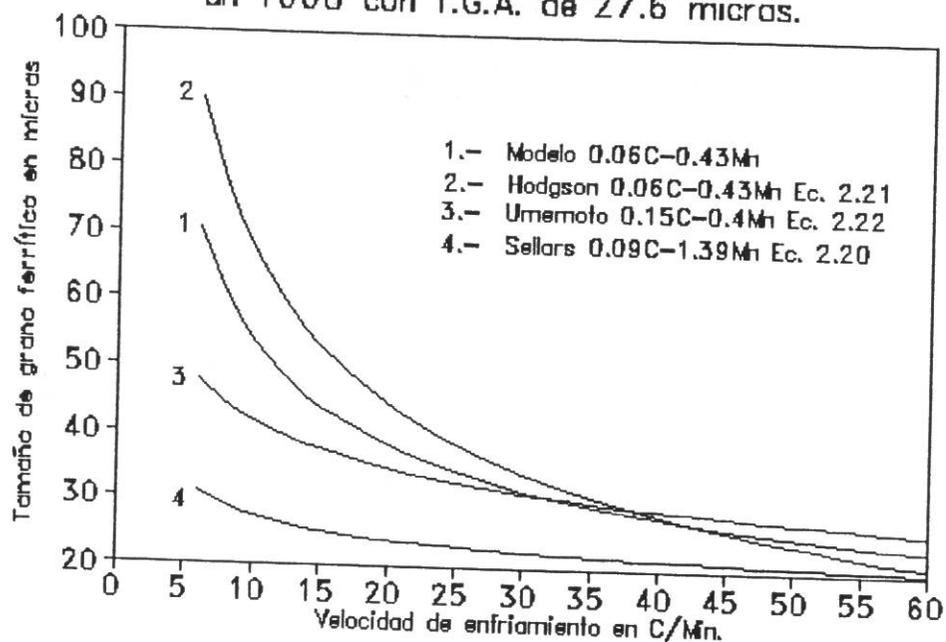


Figura 21. Tamaño de grano ferrítico calculado para distintos aceros.

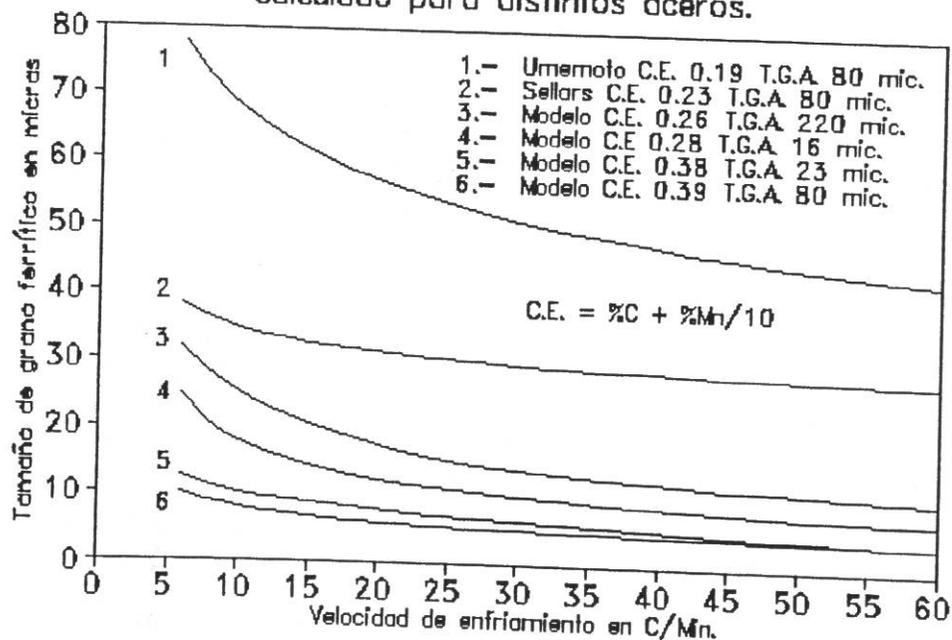


Figura 22. Efecto de la composición en los sitios de nucleación en esquina.

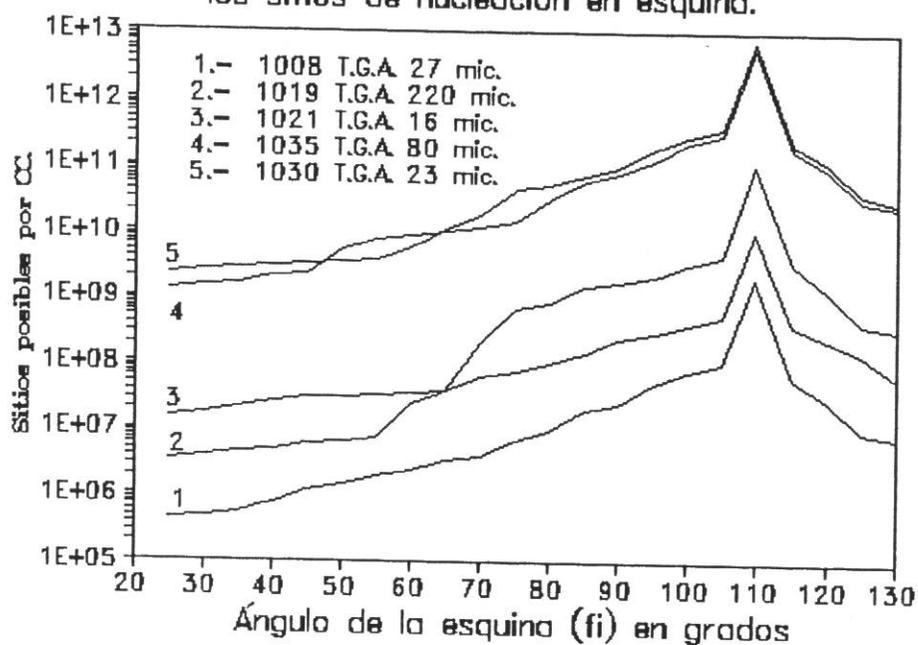


Figura 23. Efecto de la composición en los sitios de nucleación de borde.

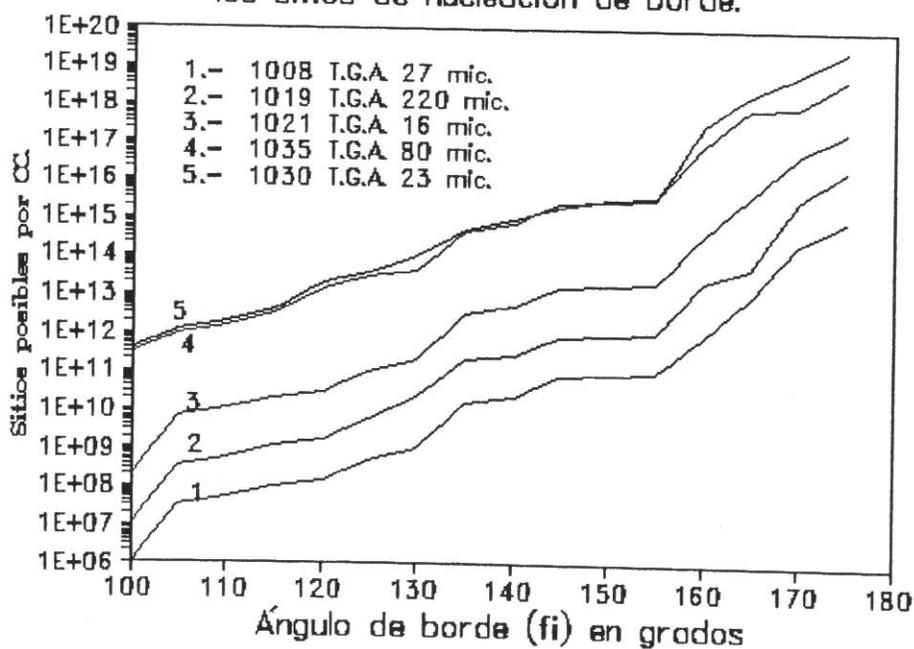


Figura 24. Sitios de nucleación en esquina en función de la composición.

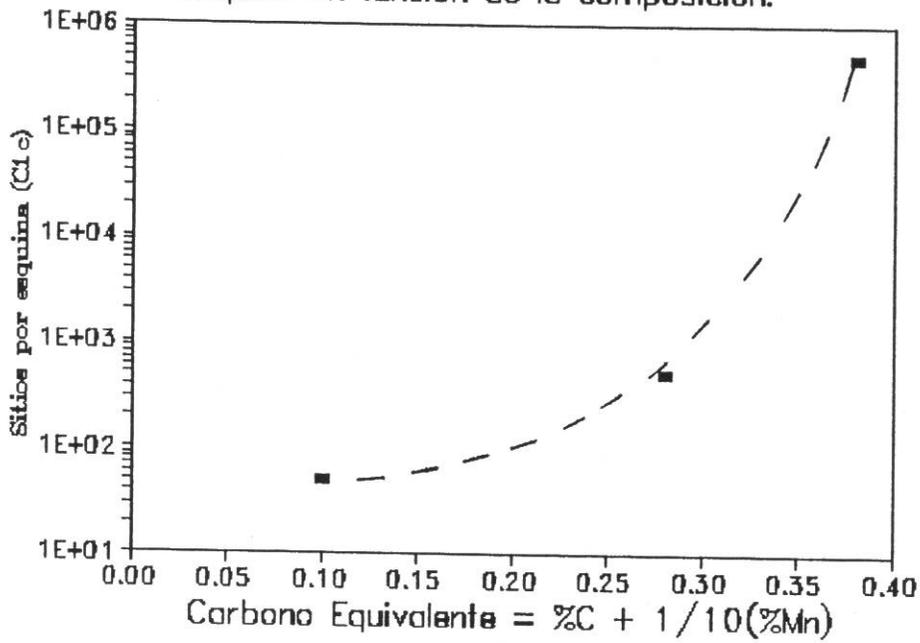


Figura 25. Sitios de nucleación por cm de borde en función de la composición.

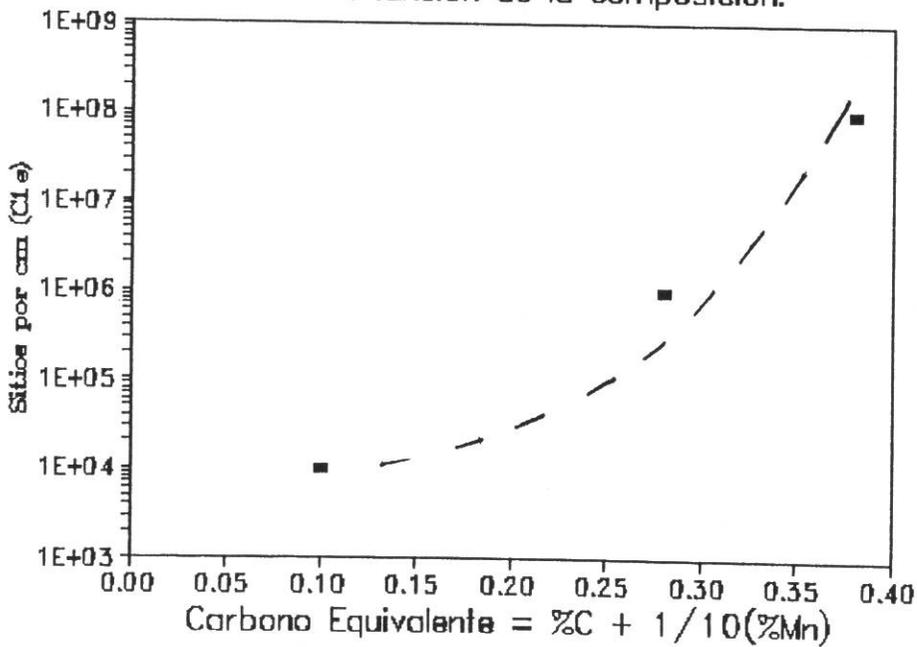


Figura 26. Distribución de ángulos de esquina.

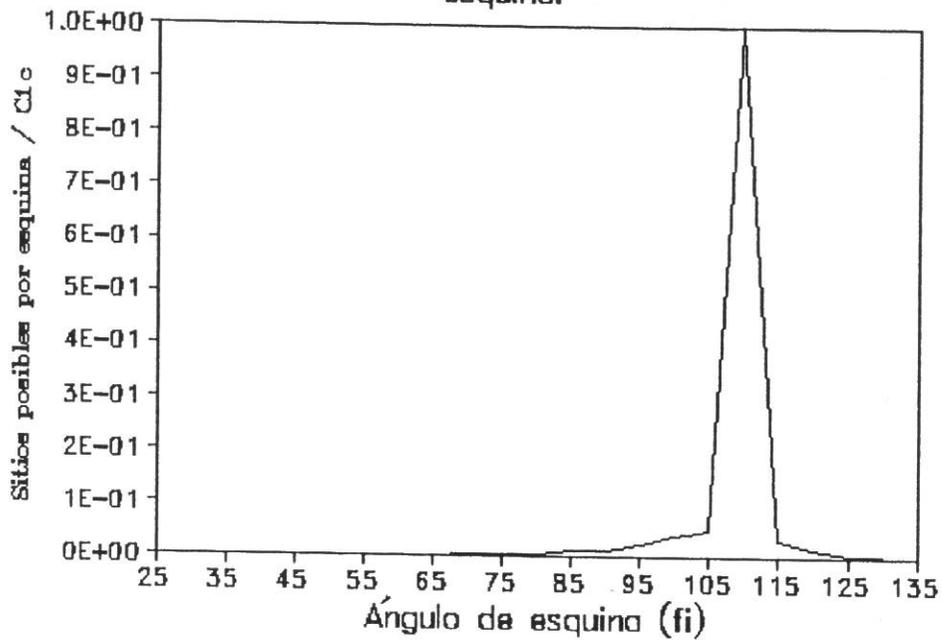


Figura 27. Distribución de ángulos de borde.

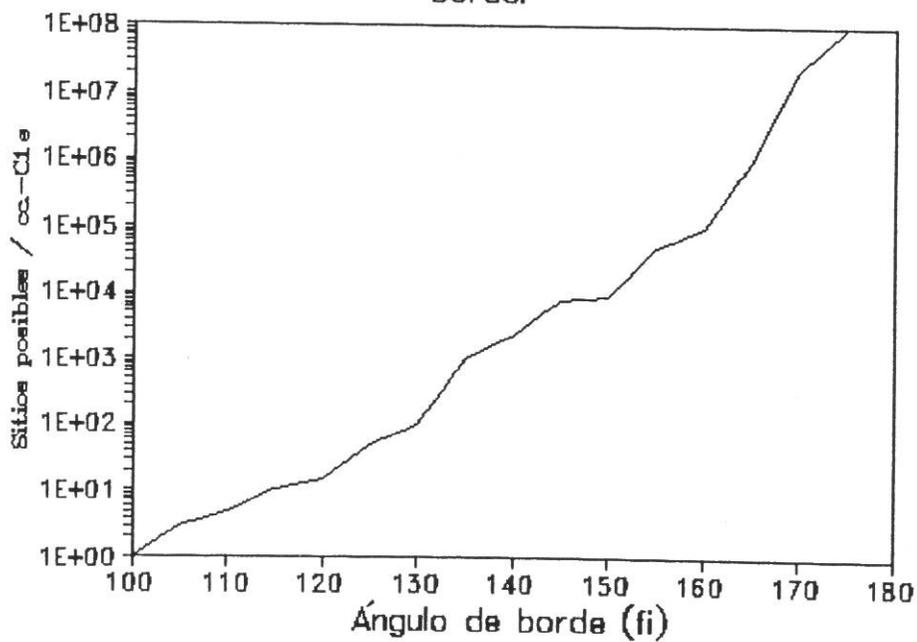
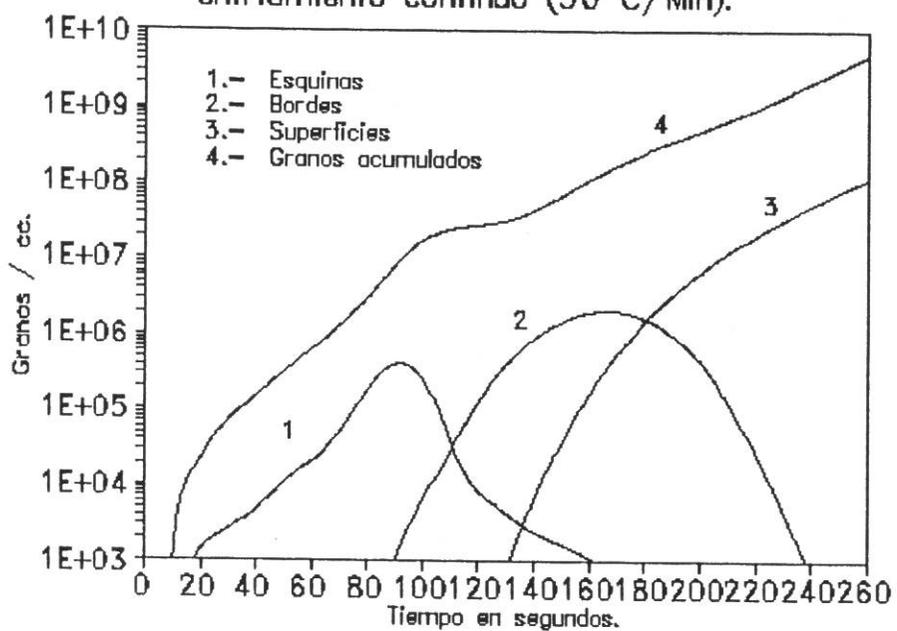


Figura 28. Granos nucleados bajo enfriamiento continuo (30 C/Min).



TM

Z5853

.M2

63090

FIME

FT

1992

67
AUTOR

MORALES CHAVELA, Julio César

TITULO

63090.

"SERPAC"
E. S. U. D. E. M. S. I. O. N. E. S.
TAPA 148 OTE. TEL 74-7041
MONTERREY, N. L.

