

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

KARLA CYBELLE ALVES DE OLIVEIRA SILVA

**ESTUDO DE SEQUÊNCIAS TERMOMECÂNICAS EM AÇOS AHSS DE PRIMEIRA
GERAÇÃO**

Recife

2019

KARLA CYBELLE ALVES DE OLIVEIRA SILVA

**ESTUDO DE SEQUÊNCIAS TERMOMECÂNICAS EM AÇOS AHSS DE PRIMEIRA
GERAÇÃO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Tecnologia e Geociências da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Área de Concentração: Materiais e Fabricação.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Artur Sanguinetti Ferreira.

Recife

2019

Catálogo na fonte
Bibliotecária Margareth Malta, CRB-4 / 1198

S586e Silva, Karla Cybelle Alves de Oliveira.
Estudo de sequências termomecânicas em aços AHSS de primeira geração
/ Karla Cybelle Alves de Oliveira Silva. – 2019.
105 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Artur Sanguinetti Ferreira.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2019.
Inclui Referências e Anexo.

1. Engenharia Mecânica. 2. Aços AHSS Dual Phase. 3. Sequências termomecânicas. 4. Propriedades mecânicas. 5. Método de Rietveld. I. Ferreira, Ricardo Artur Sanguinetti. (Orientador). II. Título.

UFPE

621 CDD (22. ed.) BCTG/2019-122

KARLA CYBELLE ALVES DE OLIVEIRA SILVA

**ESTUDO DE SEQUÊNCIAS TERMOMECÂNICAS EM AÇOS AHSS DE PRIMEIRA
GERAÇÃO**

Dissertação ou Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Centro de Tecnologia e Geociências da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Aprovada em: 01 / 02 / 2019.

BANCA EXAMINADORA

Profº. Dr. Ricardo Artur Sanguinetti Ferreira (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Profº. Dr. Yogendra Prasad Yadava (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

Profº. Dr. Tiago de Sousa Antonino (Examinador Externo)
Instituto Federal de Pernambuco

Dedico esta dissertação à Jesus.
Que é o amor que vive em cada um de nós e o guia da estrada da nossa vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por guiar todos os meus passos.

Ao meu esposo, João Manoel por apoiar-me em todo o caminho.

Ao meus pais por acreditar nos meus sonhos.

Ao meu irmão Keldjan Alves.

A toda a minha família por fazerem parte da minha história.

Ao professor Ricardo Sanguinetti por toda a orientação oferecida neste desenvolvimento desse trabalho.

Aos amigos Rubens, Janaina Cirino, Israel, Henrique e Valter pela ajuda no desenvolvimento da pesquisa.

Aos amigos e companheiros Ivana, Camila, Priscila, Bruna Cavalcanti, Vanessa Menezes, entre outros.

Agradeço em especial a Paternak por todo o suporte oferecido.

Ao professor Maximes pelo atendimento às solicitações requeridas.

Ao Programa e professores da Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco.

E por fim a Universidade Federal de Pernambuco, por proporcionar a estrutura exigida para o desenvolvimento da pesquisa.

RESUMO

Neste trabalho foi estudado a influência de sequências termomecânicas na microestrutura e propriedades mecânicas do aço AHSS DP800 Dual Phase de primeira geração. Inicialmente, os domínios de transformação de fases foram identificados por dilatometria e, baseado na identificação destes domínios, foram produzidas algumas sequências térmicas e termomecânicas. Nas sequências térmicas, o aço foi austenitizado a 900°C, durante 20 minutos, e resfriado em banho de chumbo para decomposição isotérmica a 450° e 600° C, em tempos de 15 e 30 minutos. Nas sequências termomecânicas, o aço foi austenitizado a 900°C, durante 20 minutos, seguido de uma deformação de 10% (laminação) para em seguida ser resfriado em banho de chumbo para decomposição isotérmica a 450° e 600°C, em tempos de 15 e 30 minutos. A caracterização microestrutural foi realizada por microscopia eletrônica de varredura (MEV) e difração de Raios X (DRX). As fases presentes nas microestruturas produzidas pelos diferentes tratamentos puderam ser identificadas. A quantificação das fases presentes foi feita pelo método de Rietveld, utilizando um aplicativo comercial e baseado nos difratogramas de Raios-X. As propriedades mecânicas foram determinadas por ensaio de tração uniaxial numa máquina servo-hidráulica. Os resultados mostraram que apenas a decomposição a 450°C, sem deformação prévia, foi capaz de aumentar o limite de resistência deste aço, muito embora tenha havido uma queda na sua tenacidade.

Palavras-chave: Aços AHSS Dual Phase. Sequências termomecânicas. Propriedades mecânicas. Método de Rietveld.

ABSTRACT

In this work the influence of thermomechanical sequences on the microstructure and on the mechanical properties of the first-generation steel AHSS DP800 Dual Phase. Initially, the phase transformation domains were identified by dilatometry and, based on the identification of these domains, some thermal and thermo-mechanical sequences were produced. In the thermal sequences, the steel was austenitized at 900 °C for 20 minutes and abruptly cooled in a lead bath then it was decomposed isothermally at 450 and 600 °C, in times of 15 and 30 minutes. In thermo-mechanical sequences, the steel was austenitized at 900° C for 20 minutes, followed by a 10% deformation (rolling) and then cooled in a lead bath for isothermal decomposition at 450 and 600 °C, at times of 15 °C 30 minutes. The micro-structural characterization was performed by scanning electron microscopy (SEM) and X-ray diffraction (XRD). The phases present in the microstructures produced by the different treatments could be identified. The quantification of the present phases was done by the Rietveld method, using a commercial application and based on X-ray diffractograms. The mechanical properties were determined by uniaxial traction test in servo-hydraulic equipment. The results showed that only the decomposition at 450°C, without previous deformation, was able to increase the resistance limit of this steel, although there was a decrease in its tenacity.

Keywords: Steel AHSS Dual Phase. Thermomechanical sequences. Mechanical properties. Rietveld method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1-	Relação resistência vs. Ductilidade dos aços de 1 ^a , 2 ^a e 3 ^a geração.....	16
Figura 2-	Tensão (em MPa) vs Alongamento (%) para diferentes tipos de aço e aplicados à estrutura da carroceria/chassi do automóvel.....	17
Figura 3-	Sequência termomecânica aplicado no aço AHSS DP800.....	20
Figura 4-	Efeito do estresse de tração/compressão e a temperatura inicial de estampagem na temperatura MS.....	22
Figura 5-	Dilatômetro NETZSCH DIL402PC.....	26
Figura 6-	Corpo de prova dimensionado para ensaios de tração segundo a norma ASTM E8/E8M – 09.....	26
Figura 7-	Forno Mufla Microprocessado.....	27
Figura 8-	Sequência termomecânica (L450-15).....	28
Figura 9-	Sequência termomecânica (C450-15).....	28
Figura 10-	Sequência termomecânica (L600-15).....	29
Figura 11-	Sequência termomecânica (C600-15).....	29
Figura 12-	Sequência termomecânica (L600-30).....	30
Figura 13-	Sequência termomecânica (C600-30).....	31
Figura 14-	Microscópio eletrônico da TESCAM, modelo Mira 3.....	32
Figura 15-	Fluxograma de atividades para a caracterização e avaliação do aço AHSS DP800 realizadas no trabalho.....	37
Figura 16-	Microestrutura do aço AHSS DP800 como recebido.....	38
Figura 17-	Curva de dilatometria Aço Dual Phase DP-800.....	39
Figura 18-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência termomecânica L (450-15).....	41
Figura 19-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência térmica C(450-15).....	42
Figura 20-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 Dual Phase após sequência termomecânica L(600-15).....	43
Figura 21-	Diagrama TTT hipotético para o aço DP800.....	43
Figura 22-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência	

	térmica C(600-15).....	44
Figura 23-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência termomecânica L(600-30).....	45
Figura 24-	Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 C após sequência térmica (600-30).....	46
Figura 25-	Difratograma da amostra como recebido- Aço AHSS DP800.....	47
Figura 26-	Difratograma aço AHSS DP800 + laminação a quente e decomposição térmica a 450°C por 15 minutos(L450-15).....	48
Figura 27-	Difratograma aço AHSS DP800 após decomposição termomecânica a 450°C por 15 minutos (C450-15).....	48
Figura 28-	Difratograma aço AHSS DP800 após laminação a quente +decomposição a isotérmica em banho de chumbo a 600°C por 15 minutos.....	49
Figura 29-	Difratograma aço AHSS DP800 após decomposição isotérmica a 600°C por 15 minutos.....	50
Figura 30-	Difratograma aço AHSS DP800 após laminação a quente +decomposição a isotérmica em banho de chumbo a 600°C por 30 minutos.....	51
Figura 31-	Difratograma aço Dual Phase após decomposição isotérmica a 600°C por 30 minutos.....	52
Figura 32-	Diagrama tensão x deformação na amostra L(450-15).....	54
Figura 33-	Diagrama tensão x deformação na amostra C(450-15).....	54
Figura 34-	Diagrama tensão x deformação na amostra L(600-15).....	54
Figura 35-	Diagrama tensão x deformação na amostra C(600-15).....	54
Figura 36-	Diagrama tensão x deformação na amostra L(600-30) e C(600-30).....	55
Figura 37-	Quantificação de fases na amostra L(450-15).....	58
Figura 38-	Quantificação de fases na amostra L(600-15).....	59
Figura 39-	Quantificação de fases na amostra L(600-30).....	60
Figura 40-	Ilustração bainita inferior e bainita superior.....	61
Figura 41-	Quantificação de fases na amostra C(450-15).....	62
Figura 42-	Quantificação de fases na amostra C(600-15).....	62

Figura 43- Quantificação de fases na amostra C(600-30).....	63
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1-	Composição química do aço dual phase DP800.....	24
Tabela 2-	Sequências térmicas e termomecânicas.....	40
Tabela 3-	Propriedades mecânicas do aço Dual Phase DP800.....	53

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
2	OBJETIVOS.....	15
2.1	OBJETIVO GERAL.....	15
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	15
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	16
3.1	AÇOS TRIP/DP (ALTO SI).....	18
3.2	AÇOS BAINÍTICOS SEM CARBETO.....	19
3.3	AÇOS DE TÊMPERA PARCIAL (Q & P).....	19
3.4	AÇOS ENDURECIDOS POR PRENSAGEM (PHS).....	20
3.5	AÇOS BIFÁSICOS.....	21
3.6	ASPECTOS MICROESTRUTURAIS.....	21
4	MATERIAIS E MÉTODOS.....	24
4.1	MATERIAIS.....	24
4.2	MÉTODOS.....	24
4.2.1	Caracterização microestrutural do aço AHSS DP800 como recebido.....	25
4.2.2	Ensaio de dilatométrica aço Dual Phase DP-800.....	25
4.2.3	Confecção de corpos de provas do aço Dual Phase DP-800.....	26
4.2.4	Sequências térmicas e termomecânicas aplicadas.....	27
4.2.5	Ensaio mecânicos.....	31
4.2.6	Análise microestrutural do aço AHSS DP800.....	31
4.2.7	Difração de raio-x.....	32
4.3	MÉTODO RIETVELD.....	33
4.3.1	Fatores das equações (4.3) e (4.4).....	34
4.3.1.1	Fator de escala.....	34
4.3.1.2	Fator de Lorentz.....	35
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	38
5.1	CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL DO AÇO DUAL PHASE DP-800 COMO RECEBIDO.....	38
5.2	IDENTIFICAÇÃO DOS DIFERENTES DOMÍNIOS DE TRANSFORMAÇÃO DE FASE UTILIZANDO A DILATOMETRIA.....	39

5.3	REALIZAÇÃO DAS SEQUÊNCIAS TÉRMICAS E TERMOMECÂNICAS BASEADOS NO ENSAIO DILATOMÉTRICO....	40
5.4	CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL APÓS TRATAMENTOS TÉRMICOS, IDENTIFICANDO AS MICROESTRUTURAS OBTIDAS..	41
5.5	DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DAS MICROESTRUTURAS OBTIDAS NA SEQUÊNCIA DO ITEM 4.2.4.....	46
5.6	ENSAIO MECÂNICO DO MATERIAL TRATADO TÉRMICA E TERMOMECÂNICAMENTE NA SEQUÊNCIA DO ITEM 5.4.....	53
5.7	QUANTIFICAÇÃO DE FASES EM CADA UMA DAS SEQUÊNCIAS TÉRMICAS (SEM DEFORMAÇÃO) E TERMOMECÂNICAS (COM DEFORMAÇÃO)	55
6	CONCLUSÕES.....	64
	REFERÊNCIAS.....	66
	ANEXO A - DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD.....	71

1 INTRODUÇÃO

Vários fatores impulsionam a seleção de materiais para aplicações automotivas, incluindo segurança, eficiência de combustível, ambientalismo, manufaturabilidade, durabilidade e qualidade (TAMARELLI, 2017). Na indústria automotiva altamente competitiva, o custo também é extremamente importante para a seleção de materiais. Como motivação para reduzir a massa de veículos, as montadoras continuam a intensificar as pesquisas, maximizando a eficiência de sua seleção de novos materiais. De 1980 a 2010, a porcentagem de aço usada em veículos, em relação aos outros materiais, cresceu de aproximadamente 53 para 55% (em peso). Hoje, quase 60 % destes materiais são usados em veículos leves da indústria norte-americana (TAMARELLI, 2017); isso reflete a capacidade dos aços AHSS atenderem as demandas de desempenho.

Os Aços AHSS (Advanced High-Strength Steels) continuam em desenvolvimento pelos grandes fabricantes mundiais em parcerias com as indústrias automobilísticas em todo mundo. A força motora para este desenvolvimento tem sido sempre a redução de peso e do consumo de combustível e o aumento de segurança das carrocerias dos automóveis produzidos. Os aços convencionais como os HSLA e IF, de excelente formabilidade, já não atendem mais as necessidades de resistência requeridas por este segmento industrial. Novos aços com limites de resistência que variam de 600 a 1200 MPa (A. NASSER, 2010) vêm sendo produzidos por demanda das indústrias automobilísticas, pois guardam excelentes combinações de resistência e formabilidade.

O nordeste brasileiro tem dois grandes fabricantes de automóveis (FIAT e FORD) que produzem modelos exportados para todo mundo. Nestas indústrias, já é comum a utilização de alguns dos aços AHSS. Pelas características que apresentam, poucos são os profissionais da região capazes de modificar estes aços, (considerados caixa preta), imprimindo sequências termomecânicas capazes de melhorar a resistência mecânica, preservando a trabalhabilidade e soldabilidade. Para nossa região, é extremamente necessário à preparação de recursos humanos nesta área. Baseados nos conhecimentos gerados pelo estudo, estamos nos inserindo nesta área de conhecimento tão necessária à indústria automobilística.

2 OBJETIVOS

Os objetivos gerais e específicos foram definidos de acordo com as metas ou o propósito que se desejou alcançar durante o trabalho, especificados logo a seguir.

2.1 OBJETIVOS GERAL

Estudar algumas sequências térmicas e termomecânicas capazes de modificar a microestrutura e as propriedades mecânicas do aço AHSS de primeira geração do tipo DP 800 (Dual Phase), preservando sua formabilidade e soldabilidade.

2.2 OBJETIVOS ESPECIFICOS

- Caracterizar microestruturalmente o material como recebido;
- Por dilatometria estudar as temperaturas dos domínios de transformação de fase ($\alpha+\gamma$, γ , M_s-M_F e B_s-B_F) durante aquecimento e resfriamento dos aços AHSS DP800;
- Baseado nas temperaturas de transformação, elaborar sequências térmicas e termomecânicas envolvendo aquecimento, deformação e decomposição isotérmica em banho de chumbo;
- Realizar ensaios metalográficos para posterior caracterização microestrutural utilizando microscopia eletrônica de varredura (MEV).
- Realizar difração de raios-x para identificação e quantificação (método de Rietveld) das fases presentes pós-sequências;
- Realizar ensaios mecânicos para determinação das propriedades mecânicas (resistência e ductilidade) produzidas pelas diferentes sequências térmicas e termomecânicas.

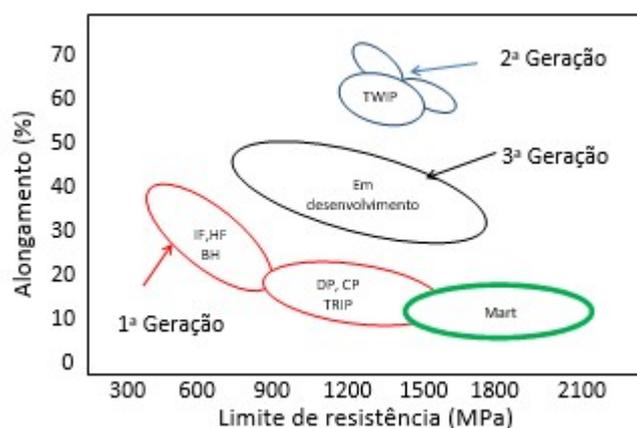
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os aços AHSS caracterizam-se por suas excelentes propriedades mecânicas, combinando resistência com ductilidade. Por estas características, estes aços vêm sendo utilizado na indústria automobilística, por possibilitar a redução de espessura das chapas (peso) e do consumo de combustível, aumentando a segurança dos passageiros, num eventual choque frontal (TAMARELLI, 2011). Os “Advanced High Strength Steel” (AHSS) são aços ao C, Mn, Si, que, dependendo das microestruturas e propriedades mecânicas desejadas, podem ser microligados ao Cr, Mo, V, Ni, Al, B, Nb ou Ti (SHRIKANT, 2015).

O nióbio tem papel relevante no refino de grãos e o manganês na estabilização da austenita à temperatura ambiente. Os demais atuam como endurecedores em solução sólida ou por precipitação de carbeto (HEISTERKAMP; CARNEIRO, 2015).

Estes aços são classificados segundo sua capacidade de resistir e se alongar, conforme ilustrado no diagrama (Figura. 1) abaixo.

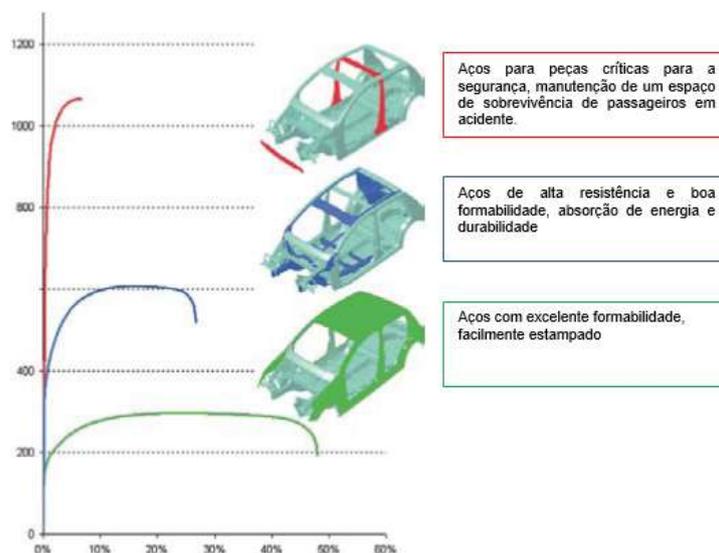
Figura 1- Relação resistência vs. Ductilidade dos aços de 1ª, 2ª e 3ª geração



Fonte: Adaptado de TAMARELLI, 2017.

Sob esta ótica, os “Advanced High Strength Steel” (AHSS) oferecem uma oportunidade para o desenvolvimento de peças leves com segurança aprimorada e excelente desempenho para aplicações automotivas (fig. 2).

Figura 2- Tensão (em MPa) vs Alongamento (%) para diferentes tipos de aço e aplicados à estrutura da carroceria/chassi do automóvel



Fonte: Adaptado GRAJCAR, 2012.

A primeira geração destes aços AHSS é baseada na transformação da ferrita. Estes aços têm grande resistência e formabilidade devido ao desenvolvimento de microestruturas mais complexas, obtidas através de processos de resfriamento controlado (TAMARELLI, 2017). Os principais aços da primeira geração são do tipo:

- Dupla fase (DP)
- Ferítico-bainítico (FB), incluindo o aço (SF) estiramento-flangeável
- Fase complexa (CP)
- Martensítica (MS)
- Plasticidade induzida pela transformação (TRIP)
- Conformado a quente (HF)

A segunda geração dos aços AHSS é baseada na transformação controlada da austenita através de sequência termomecânica capaz de produzir a maclação nos seus contornos de grãos:

- Plasticidade induzida pela maclação (TWIP)

Alto teor de manganês (em torno de 20%, em peso) destes aços de segunda geração permite que esta estrutura austenítica maclada (TWIP) se estabilize à temperatura ambiente.

Os aços TRIP e TWIP (primeira e segunda geração) têm microestruturas complexas (multifases), contendo constituintes como B, Mn e Al para aumentar a resistência, além dos teores de C e Si aumentados para intensificar o endurecimento pela formação da Martensita, preservando a formabilidade por deformação (maclação) da austenita residual. (A. NASSER, 2010) (HILDITCH; SOUZA; HODGSON, 2015).

Os aços com plasticidade induzida pela maclação (TWIP), considerados da 2ª geração ainda não foram usados em quantidade representativa, principalmente por seu elevado nível de Mn (cerca de 20% em peso), o que leva a problemas de processamento associados à estampagem. As tensões circunferenciais de um embutido, normalmente ultrapassam os limites de resistência deste tipo de aço (GRONOSTAJSKI *et al.*, 2017) (ZHAO *et al.*, 2016). Devido aos problemas apresentados com estes aços, uma 3ª geração de aços AHSS, com propriedades entre as duas gerações anteriores, estão em desenvolvimento.

A 3ª geração dos aços AHSS é basicamente uma adaptação dos aços DP e TRIP, com uma quantidade significativa menor de Mn que nos aços TWIP, mas com teor suficiente para estabilizar a austenita (metaestável) durante sequenciamento termomecânico adequado (AYDIN *et al.*, 2013) (A.GRAJCAR, 2012).

Estes aços de terceira geração estão sendo projetados para preencher a região entre os aços de primeira geração (DP e TRIP) e os aços de segunda geração (TWIP). A ductilidade será elevada em relação aos aços de primeira geração, preservando os níveis de resistência destes AHSS convencionais. Algumas tendências tecnológicas indicam o processo Q & P (Quenching & Partitioning) como um dos possíveis para atingir esse objetivo. Outras ideias incluem aço trifásico assistido por TRIP, aços de alto manganês e aços bainíticos sem carbeto (CFB). Finalmente, os aços endurecidos por prensagem (PHS) fazem parte desta importante estratégia para fabricação de veículos futuros. Apresentamos abaixo algumas das famílias destes aços avançados de alta resistência, com ou sem adições de ligas, utilizados na indústria automotiva.

3.1 AÇOS TRIP/DP (ALTO Si)

Uma maneira para se produzir um aço de terceira geração partindo de um aço de primeira geração (DP) consiste em adicionar Si. Isto pode ser explicado pelo fato

de que o reforço por Si aumenta a resistência da ferrita (aproximadamente 90-120 MPa) (PICKERING, 1978). A partir do controle das frações volumétricas entre ferrita (reforçada) e martensita, produzidas por uma sequência termomecânica adequada, pode-se atingir a mesma Aços Austenítico/Martensítico (médio Mn).

Um outro design de liga que vem recebendo muita atenção tem sido os aços contendo 4-8% Mn. Em 1972, Miller (RL, 1972), produziu um aço contendo 0,11% C, 6% Mn aço que continha 60-70% de ferrita poligonal e 30-40% de austenita retida. O material com esta microestrutura bifásica apresentou boa resistência e excelente ductilidade. Este conceito foi estudado por (MATLOCK DK, 2012), que sugeriu que a estabilidade da austenita em elevada fração volumétrica pode ser para produção de um aço de terceira geração. Uma sequência termomecânica deve ser empreendida para possibilitar a maclação da austenita retida.

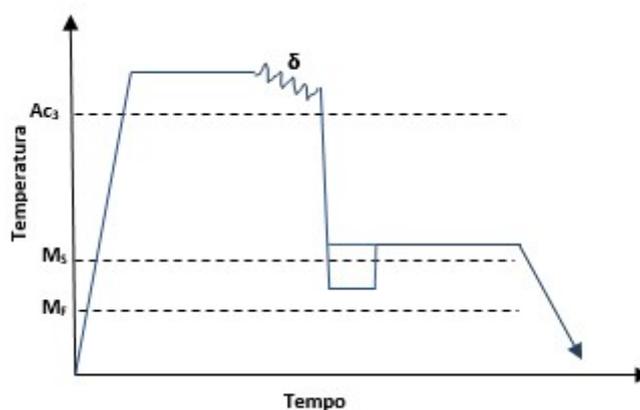
3.2 AÇOS BAINÍTICOS SEM CARBETO

O conceito de aço bainítico para atingir os alvos da 3ª Geração AHSS foi proposto, há algum tempo, pelo estudo do Prof. K. Sugimoto (SUGIMOTO K, 2000) (SUGIMOTO K, 2007) (SUGIMOTO K, 2002). Nestes aços, a microestrutura é constituída por bainita com lâminas sem carbeto livres e austenita retida. A ausência de carbeto fino e o tamanho de grão ultrafino contendo placas de bainítica, acompanhadas pela contribuição do efeito TRIP na austenita retida, conferem simultaneamente alta resistência e alta absorção de energia. Contudo, para se conseguir um alongamento elevado ao mesmo tempo que a resistência, seria necessário um C superior a 0,20% em combinação com Si elevado neste aço.

3.3 AÇOS DE TÊMPERA PARCIAL (Q & P)

Quenching & Partitioning (Q & P) tem sido proposto recentemente como uma nova forma para se produzir aços martensíticos contendo níveis reforçados de austenita retida (SPEER J, 2003) (SPEER *et al.*, 2011). O processo, ilustrado esquematicamente na Figura 3, consiste em um tratamento termomecânico em duas fases em que o aço é temperado a uma temperatura predeterminada entre Ms-Mf (temperatura de início e final do domínio martensítico) para produzir uma microestrutura parcialmente martensítica, parcialmente austenítica.

Figura 3 - Sequência termomecânica aplicado no aço AHSS DP800.



Fonte: A autora, 2019.

O segundo, o chamado passo de divisão, visa o enriquecimento (parcial) de carbono da austenita pela difusão de carbono oriundo da martensita. Assim, a austenita estabilizada em carbono é retida na microestrutura até à temperatura ambiente. Estas frações remanescentes de austenita retida foram analisadas por De Moore *et al* (DE MOOR E, 2009) (DE MOOR E, 2008) e apresentavam uma resistência melhorada.

3.4 AÇOS ENDURECIDOS POR PRENSAGEM (PHS)

Embora não seja estritamente um aço AHSS de 3º Geração, nenhuma discussão estaria completa sem incluir os aços PHS. Este excitante desenvolvimento pioneiro da ArcelorMittal (BHATTACHARYA, 2014) é a produção de aços de alta resistência durante o processo de estampagem a quente. Uma vez que estes são aços de baixa resistência quando são estampados, eles têm alta formabilidade para formar partes complexas, mas durante o processo de têmpera após a estampagem, uma fração significativa de martensita é formada, dando assim uma resistência muito alta na parte formada. USIBOR 1500® é um exemplo de tal aço. Agora os aços USIBOR 2000 e DUCTIBOR, que são aços com maior ductilidade, ainda estão sendo desenvolvidos. Aços com estas características são desejados pelos fabricantes de automóveis para conseguir consumo da ordem de 54.5 mpg (milhas por galão) que é o valor requerido pela lei nos EUA para um futuro próximo.

3.5 AÇOS BIFÁSICOS

Os aços DP (Dual-Phase) são melhores que os aços convencionais apresentando uma ótima relação entre resistência e conformação devido a esta condição são amplamente utilizados na indústria automobilística.

O DP dual-Phase) é composta por duas fases, onde a microestrutura é composta por uma matriz ferrítica e dispersas ilhas de martensita. Onde o tamanho do grão da ferrita e a fração volumétrica da martensita são condições de controle das propriedades mecânicas. A fase ferrítica estabelece a ductilidade dos aços, se deforma com maior facilidade quando os aços e submetido a deformação por possuir menor resistência. Envolve ilhas de martensita gerando alta taxa de encruamento. A relação de alongamento e encruamento resulta em um alto limite de resistência conferido a esses aços (NIGRI, 2018).

Para valores altos de ductilidade, em geral devido a baixos valores de razão elástica, o material demonstra uma maior capacidade de encruamento, fornecendo assim um melhor desempenho em operações de conformação (ARAUJO,2013).

Segundo (N. SAEIDI, 2009) independentemente da temperatura de teste para uma melhor combinação de força e ductibilidade é indicado a combinação de 25% de bainita inferior contendo martensita temperada, ao inves de utilizar martensita total não temperada. A fração de bainita inferior observada favorece uma maior resistencia a fratura por fratura fragil a baixas temperaturas.

3.6 ASPECTOS MICROESTRUTURAIS

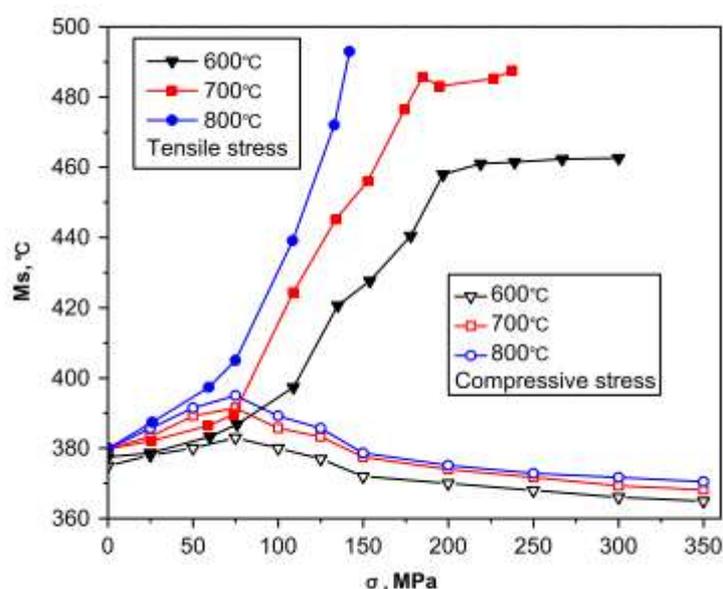
Um número muito grande de estudos está sendo desenvolvido objetivando-se o endurecimento por deformação em aços multifásicos. Uma das teorias utilizadas é a proposta por Ashby para aços não homogêneos (ASHBY, 1970).

Os estudos desenvolvidos atualmente procuram um resultado de maior resistência mecânica a partir de aplicação de deformação para o aparecimento de uma segunda ou terceira fase.

O controle das transformações de fase na região de deformação elástica é um dos pontos importantes para as características dos aços multifásicos de baixa liga.

Segundo (Y. CHANG, 2015) a transformação completa da martensita aumenta o limite de resistência acima de 1500MPa e a dureza por volta de 450HV quando temperado em água e o aumento da temperatura inicial da martensita pode estar associado a deformação uniaxial em altas temperaturas. Poucos estudos detalham a influência do estado de tensão e a intensidade da tensão aplicado em chapas de aço.

Figura 4 - Efeito do estresse de tração/compressão e a temperatura inicial de estampagem na temperatura MS



Fonte: CHANG, 2015.

De acordo (SHANCHEN, 2017) muitos estudos focam na relação da quantidade de carbono dissolvido e a estabilidade da austenita, porém o efeito da transformação da bainita é ignorada. Já existem evidências de que a transformação de bainita ocorre a 300°C que pode ser atribuído a presença de martensita primária. A martensita primária pode aumentar a densidade de discordâncias da austenita no limite da fase e, portanto, aumenta a transformação da bainita. A adição de cobalto (Co) promove a transformação da bainita, enquanto Al e Mn diminui esta transformação.

A análise da quantificação da heterogeneidade da microestrutura do aço de fases dupla é pouco estudada. Em 2017, REN, C. *et al*, estudaram a

heterogeneidade da microestrutura do aço DP, a tensão plástica e o gradiente do campo de tensão do aço DP através do método PIM. A análise quantificada do comportamento de endurecimento de tensão do material a partir da deformação microestrutural, mostrou que a tensão total do material é maior que a tensão da martensita e menor que a tensão da ferrita. O tamanho de grão influencia mais no gradiente de deformação do que na tensão plástica.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo estão descritas de preparação dos corpos de prova e do desenvolvimento das sequências térmicas e termomecânicas, assim como as técnicas de caracterização dos corpos de prova e a avaliação das propriedades mecânicas do aço AHSS DP800.

4.1 MATERIAIS

O material para estudo foram chapas finas de aços comerciais AHSS de primeira geração (nas espessuras variando de 1,28 mm a 1,35 mm) do tipo DP800 (Dual Phase), fornecidos pelas indústrias automobilísticas da região. A composição química do material como recebido está dada na tabela 1.

Os domínios de temperatura das transformações de fase foram levantados por dilatometria diferencial. Baseado nos acidentes sobre as curvas de dilatometria, os domínios foram identificados e a partir desta identificação, os aços foram submetidos a dois sequenciamentos termomecânicos, conforme mostrado tabela 2 mostradas adiante.

Tabela 1 - Composição química do aço dual phase-DP800

	C%	Si%	Mn%	P%	S%	Al%	Nb%
DP-800	0,13	0,20	1,50	0,010	0,002	0,040	0,015

Fonte: Docol, 2014.

4.2 MÉTODOS

Os métodos utilizados neste trabalho estão descritos na ordem de execução das atividades do estudo.

4.2.1 Caracterização microestrutural do aço AHSS DP800 como recebido

A microestrutura no aço AHSS DP800, como recebido, foi obtida por microscopia eletrônica de varredura (MEV).

4.2.2 Ensaio de dilatométrica aço Dual Phase DP800

A dilatométrica é uma técnica simples, baseada nas dilatações resultantes das transformações de fases, que ocorrem na amostra quando se aplica um ciclo térmico, produzidas pelas transformações das fases em função da temperatura. Neste trabalho, estes ensaios foram realizados usando-se um dilatômetro diferencial NETZSCH DIL402PC (figura 5), disponível no departamento de Engenharia Mecânica da UFPE. Esses ensaios permitiram determinar os domínios de transformação de fase do aço DP800 em função da temperatura. Baseado nos resultados da dilatométrica, foram propostas as sequências térmicas e termomecânica deste estudo.

O dilatômetro DIL 402 PC apresenta as seguintes especificações técnicas:

- faixa de temperatura: temperatura ambiente a 900°C;
- taxas de aquecimento: 0,01°C/min a 50°C/min;
- faixa de medição: 500/5000 μm ;
- comprimento da amostra: 50 mm (máx.);
- diâmetro da amostra: 12 mm (máx.);
- resolução Δl : 8 nm;
- eletrônica integrada;

Figura 5 - Dilatômetro NETZSCH DIL402PC

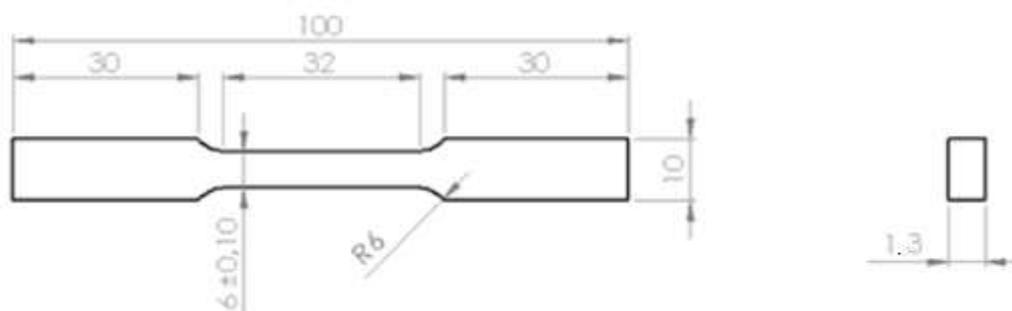


Fonte: A autora, 2019.

4.2.3 Confeção de corpos de provas do aço Dual Phase DP800

Foram confeccionados três corpos de prova para cada condição termomecânica, incluindo tratamentos térmicos e processos de laminação, no total de 18 corpos de prova de tração. Os corpos de prova para ensaio de tração foram inicialmente cortados em uma fresadora nas dimensões de 210 x 100 mm e 1,35 mm de espessura da chapa. A figura 6 mostra o esboço do corpo de prova de tração que foi utilizado.

Figura 6 - Corpo de prova dimensionado para ensaios de tração segundo a norma ASTM E8/E8M - 09



Fonte: ASTM, 2018.

4.2.4 Sequências térmicas e termomecânicas aplicadas

Para realização das sequências térmicas e termomecânicas foram usados dois fornos do tipo mufla (figura 7), monitorados por termopares tipo K (cromel-alumel). A deformação iniciada no domínio austenítico será feita num laminador do tipo ourives a uma taxa de deformação de 1,8/seg. Os tratamentos isotérmicos foram feitos em banho de chumbo. Antes da aplicação dos tratamentos termomecânicos, foram realizados ensaios dilatométrico para avaliar as temperaturas de transformações de fase no aço estudado.

Conhecidas as transformações de fase, foram realizados tratamentos termomecânicos em diferentes temperaturas. Os seguintes tratamentos térmicos e termomecânicos:

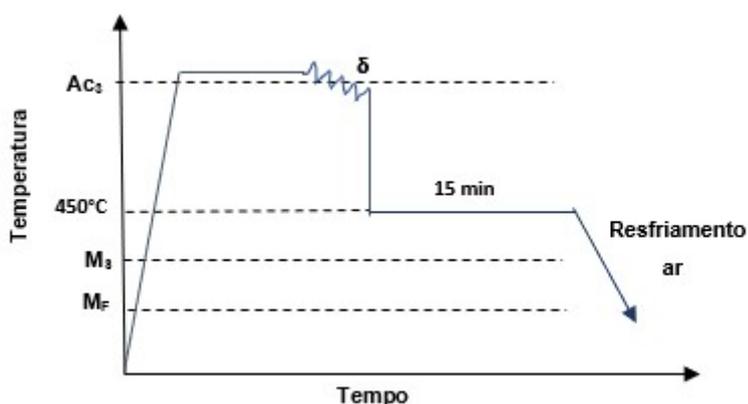
Figura 7 - Forno Mufla Microprocessado.



Fonte: A autora, 2019.

Tratamento **(L450-15)**: Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do A_{c3} (900°C-segundo dilatometria), e nele permanecer durante 20 minutos. Passado este tempo de austenização, o material será deformado 10% por laminação a quente, o final do processo de deformação foi inferior à temperatura A_{c3} (aproximadamente 725°C). Após a deformação, o material foi resfriado em um banho isotérmico mantido numa temperatura a 450°C por 15 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 8.

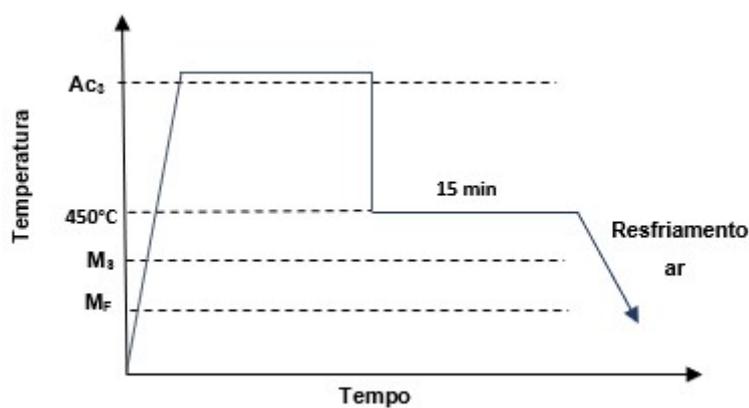
Figura 8 - Sequência termomecânica (L450-15)



Fonte: A autora, 2019.

Tratamento (**C450-15**): Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do Ac_3 (900°C-segundo dilatometria). Após a austenitização, o material foi resfriado em um banho isotérmico mantido numa temperatura acima da M_s . No estado de têmpera parcial, a mostra permaneceu numa temperatura de patamar isotérmico a 450°C por 15 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 9.

Figura 9 - Sequência termomecânica (C450-15)

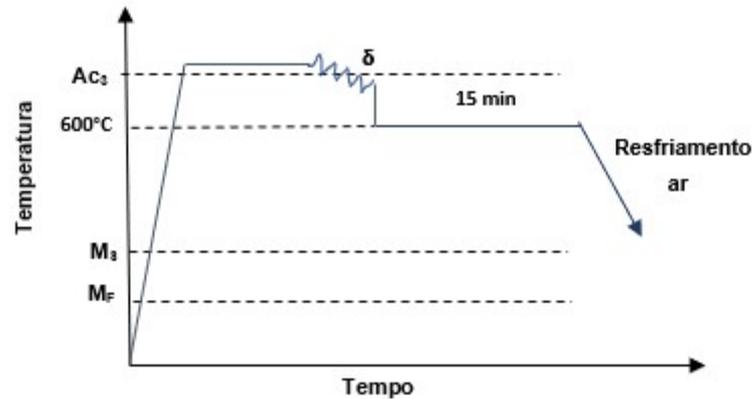


Fonte: A autora, 2019.

Tratamento (**L600-15**): Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do Ac_3 (900°C-segundo dilatometria), e nele permanecer durante 20 minutos. Passado este tempo de austenização, o material será deformado 10% por laminação a quente, o final do processo de deformação foi inferior à temperatura Ac_3 (aproximadamente 725°C). Após a deformação, o material foi resfriado em um

banho isotérmico mantido numa temperatura acima da M_s . No estado de têmpera parcial, a mostra permaneceu numa temperatura de patamar isotérmico a 600°C por 15 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 10.

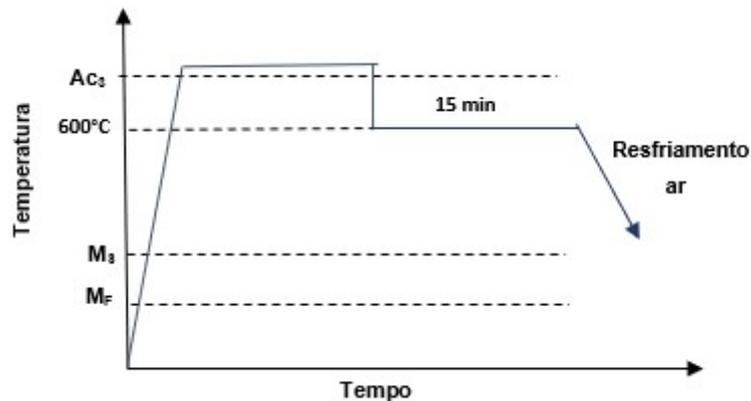
Figura 10 - Sequência termomecânica (L600-15)



Fonte: A autora, 2019.

Tratamento **(C600-15)**: Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do Ac_3 (900°C-segundo dilatometria). Após a austenitização, o material foi resfriado bruscamente em um banho isotérmico mantido numa temperatura acima da M_s . No estado de têmpera parcial, a mostra permaneceu numa temperatura de patamar isotérmico a 600°C por 15 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 11.

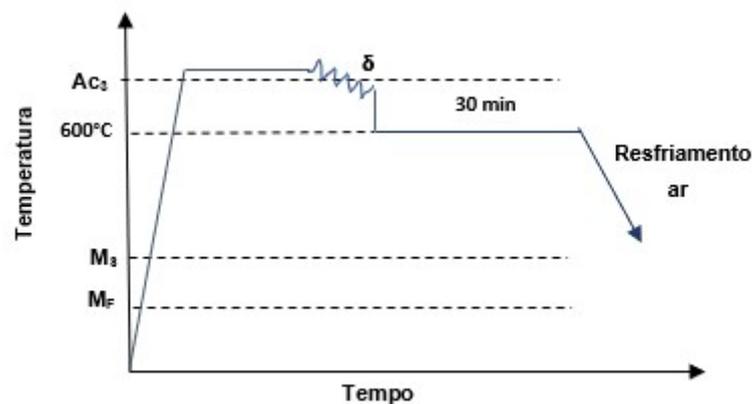
Figura 11 - Sequência termomecânica (C600-15)



Fonte: A autora, 2019.

Tratamento **(L600-30)**: Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do A_{c3} (900°C -segundo dilatometria), e nele permanecer durante 20 minutos. Passado este tempo de austenização, o material será deformado 10% por laminação a quente, o final do processo de deformação foi inferior à temperatura A_{c3} (aproximadamente 725°C). Após a deformação, o material foi resfriado em um banho isotérmico mantido numa temperatura acima da M_s . No estado de têmpera parcial, a mostra permaneceu numa temperatura de patamar isotérmico a 600°C por 30 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 12.

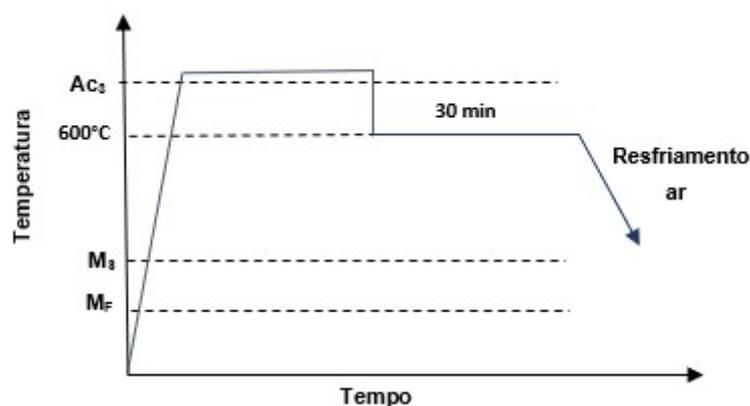
Figura 12 - Sequência termomecânica (L600-30)



Fonte: A autora, 2019.

Tratamento **(C600-30)**: Inicialmente, o material será aquecido até o domínio austenítico, acima do A_{c3} (900°C -segundo dilatometria). Após a austenitização, o material foi resfriado em um banho isotérmico mantido numa temperatura acima da M_s . No estado de têmpera parcial, a mostra permaneceu numa temperatura de patamar isotérmico a 600°C por 30 minutos e resfriados à temperatura ambiente, conforme mostra o diagrama esquemático da Figura 13.

Figura 13 - Sequência termomecânica (C600-30)



Fonte: A autora, 2019.

Estas sequências térmicas ou termomecânicas deverão produzir estruturas complexas composta de austenita retida, constituinte MA, ferrita e bainita considerando-se que a decomposição deve acontecer em temperaturas superiores a M_s .)

4.2.5 Ensaio mecânicos

Para avaliar as propriedades mecânicas destes materiais que foram tratados térmica e termomecânicamente em diferentes condições, ensaios de tração uniaxial foram aplicados de acordo com as normas ASTM E 8 M. Nestes ensaios, será utilizada uma máquina servo-hidráulica universal de 10 ton. Os dados de deformação serão obtidos por extensômetros montado diretamente nos corpos de provas na região mais susceptível à deformação. Uma quantidade de três ensaios foi realizada para assegurar a reprodutibilidade dos valores.

Todos os equipamentos utilizados no estudo pertencem ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Pernambuco, exceto o microscópio de varredura que pertence ao DF – Departamento de Física.

4.2.6 Análise microestrutural do aço AHSS DP800

Para caracterização microestrutural do aço Dual Phase DP 800 foram realizados os procedimentos metalográficos tradicionais: corte dos corpos de prova, embutimento, lixamento (220, 400, 600, 800, e 1200 mesh) e polimento em tapete

com pasta diamantada de 1 μm . A preparação metalográfica foi finalizada pelo ataque químico em nital a 2% com tempo de imersão de 10 segundos. Depois da metalografia, as amostras do material tratado e como recebido foram caracterizadas microestruturalmente por microscopia ótica e microscopia eletrônica de Varredura.

Para caracterização foi usado um microscópio eletrônico da TESCAM, modelo Mira 3, conforme mostrado na figura 14.

Figura 14 - Microscópio eletrônico da TESCAM, modelo Mira 3



Fonte: A autora, 2019.

4.2.7 Difração de raio-x

Os difratogramas de raio-x dos corpos de prova de aço Dual Phase foram obtidos por um difratômetro da marca Shimadzu XRD-.7000 usando radiação de $\text{Cu-K}\alpha$.

Os parâmetros utilizados no equipamento foram os seguintes:

- Método de Bragg – Brentano
- Varredura de 40 a 100°
- Passo: tempo 1 segundo;
- Anodo: Cu
- Voltagem: 30 kVolts
- Corrente: 40 mA
- Fendas: 1mm, e 0.2 mm
- Filtro: Potássio

Os difratogramas de raio-x obtidos para cada uma das amostras foram comparados com os valores de 2θ (valores dos ângulos de incidência dos raios-x) característicos para a Austenita retida, Bainita, Ferrita e Martensita com os difratogramas padrão das fases a partir do banco de dados COD (Crystallography Open Data Base) que é base das informações para aplicação das simulações computacionais do software High Score Plus utilizado neste estudo para a quantificação das fases.

4.3 MÉTODO RIETVELD

O método foi desenvolvido por Hugo Rietveld, cristalógrafo Holandês, é utilizado em larga escala para a caracterização de materiais cristalinos, sólidos ou em pó. Os dados experimentais consistem na aplicação de raios X gerando padrões de difrações em posições angulares 2θ através de reflexões de Bragg. A determinação precisa da estrutura do material depende da altura, largura e as posições dessas reflexões. O refinamento dos perfis teóricos para que se aproximem dos perfis medidos se dá através do método matemático dos mínimos quadrados onde o método Rietveld está relacionado (SASAKI, 2017).

O método matemático dos mínimos quadrados é o que melhor se ajusta, para a minimização dos resíduos, S_y .

$$S_y = \sum_i w_i (y_{exp} - y_{calc})^2 \quad (1)$$

Onde:

y_{exp} é a intensidade observada para o i-ésimo ponto;

y_{calc} é a intensidade calculada para o i – éximo ponto

w_i é o peso de cada intensidade dado por $w_i = \frac{1}{y_i}$

A intensidade é a quantidade fundamental do refinamento estrutural do difratograma.

$$y_{ci} = S_t \sum_k L_{Pk} |F_k|^2 \emptyset (2\theta_i - 2\theta_k) P_k A + y_{bi} \quad (2)$$

Onde:

S_t é o fator de escala;

K é o índice de Miller para reflexão de Bragg;

L_{Pk} representa a função de polarização e função de Lorentz;

\emptyset é a função do perfil de reflexão;

P_k é função de orientação preferencial

A é o fator de absorção

F_k é o fator de estrutura para a k-ésima reflexão de Bragg, e

y_{bi} é a intensidade da radiação de fundo na i-esima interação.

Para várias fases, o índice t é referente a cada fase, a equação se torna:

$$y_{ci} = \sum_t S_t \sum_k L_{k,t} |F_{k,t}|^2 \emptyset_t (2\theta_i - 2\theta_{kt}) P_{k,t} A_t + y_{bi} \quad (3)$$

4.3.1 Fatores das equações (1) e (2)

Para avaliação do refinamento do método de Rietveld dois fatores foram importantes para indicar a qualidade da aplicação neste estudo.

4.3.1.1 Fator de escala

O fator de escala S_t é a constante que ajusta a intensidade em relação à altura dos picos. A aproximação correta do fator de escala é fundamental na análise quantitativa de fase, onde a fração de cada fase é dada pela equação:

$$w_t = \frac{S_t (ZMV)_t}{\sum_j S_j (ZMV)_j} \quad (4)$$

w_t = é a fração de massa da fase t;

S_t = é a fator de escala da fase t;

Z_t = é o número de fórmulas químicas por célula unitária da fase t;

M_t = é a massa de uma fórmula química da fase t

4.3.1.2 Fator de Lorentz

O fator de Lorentz, é um fator de correção para corrigir o efeito da divergência do feixe de raios X incidente e a monocromatização parcial. Em um determinado plano este efeito pode favorecer a reflexão.

$$L_F = \frac{1}{\sin 2\theta \sin \theta} \quad (5)$$

O fator de polarização é um fator de correção para corrigir a polarização causada pela passagem dos raios X na amostra quando a onda incidente no cristal se divide em duas direções privilegiadas (KLUG, 1974).

$$P_F = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \quad (6)$$

Os fatores das equações (4.6) e (4.7) podem ser combinados no fator de Lorentz e de polarização.

$$L_{PF} = \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \quad (7)$$

Os cálculos baseiam-se em informações de pico extraídas dos resultados de ajuste de perfil. As posições de pico são usadas para calcular parâmetros de estrutura de célula unitária. As larguras dos picos como suas formas são usadas para calcular o tamanho do cristalito e a análise da microestrutura. As intensidades dos picos são usadas para calcular a fração de peso de cada fase em uma mistura (PRESTON, 1989).

Os indicadores da qualidade do refinamento estão relacionados aos índices numéricos R_{wp} e R_{exp} é a medida da qualidade do ajuste entre o que foi calculado e o observado e R_{exp} mede a qualidade das intensidades obtidas.

$$R_{wp} = \left[\frac{\sum w_i (y_{exp} - y_{cal})^2}{\sum w_i (y_{exp})^2} \right]^{1/2} \quad (8)$$

$$R_{exp} = \left[\frac{(N - P)}{\sum w_i (y_{exp})^2} \right]^{1/2} \quad (9)$$

Onde; N=Número de pontos obtidos no padrão de difração.

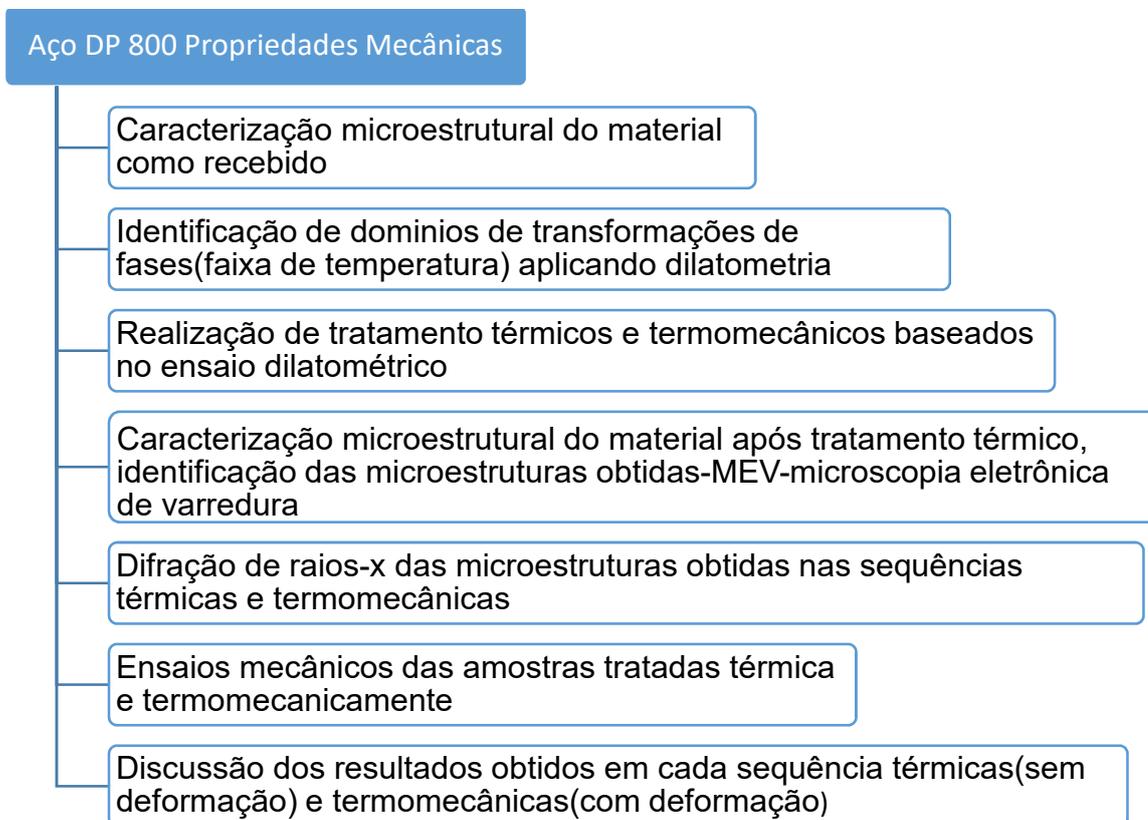
P=Número de parâmetros refinados.

GOF (Goodness of fit) compara R_{wp} a R_{exp} , um GOF = 1 significa que o modelo é o melhor possível. Para um bom refinamento o GOF deve ser menor que 4. Uma maneira de melhorar o GOF é melhorar os dados diminuindo os ruídos (SPEAKMAN,2018).

$$GOF = X^2 = \left[\frac{R_{wp}}{R_{exp}} \right]^2 \quad (10)$$

A figura 15 mostra o fluxograma indicando a ordem das atividades executadas neste estudo para avaliação e caracterização do aço DP 800.

Figura 15 - Fluxograma de atividades para a caracterização e avaliação do aço AHSS DP800 realizadas no trabalho



Fonte: A autora, 2019.

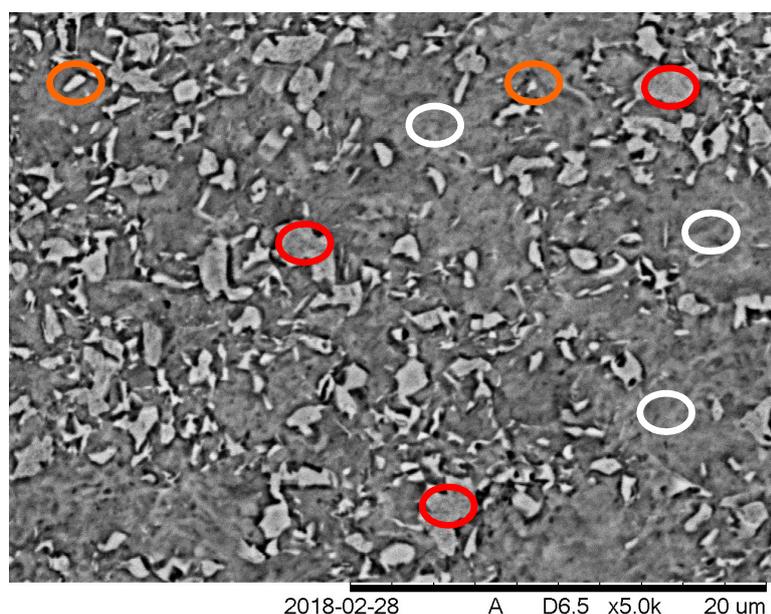
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com os experimentos realizados foram observadas diferentes transformações de fases. Na primeira etapa, foi feita a caracterização microestrutural do aço Dual Phase DP-800 na condição de como recebido. Na segunda etapa a identificação dos diferentes domínios de transformação de fase utilizando a dilatometria. Na terceira etapa realização dos tratamentos térmicos e termomecânicos baseados no ensaio dilatométrico. Na quarta etapa caracterização microestrutural do material após tratamento térmico, identificando as microestruturas obtidas. Na quinta etapa, obtenção de difratogramas de raio-x dos corpos de prova utilizadas. Na sexta etapa aplicação de ensaios mecânicos nas amostras tratadas térmica e termomecânicamente.

5.1 CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL DO AÇO DUAL PHASE DP800 COMO RECEBIDO

A microestrutura no aço AHSS DP800, como recebido, era esperado ser constituídas de basicamente martensita em matriz ferrítica. Porém o material de análise cedido apresenta três fases: bainita (círculo branco), austenita retida (círculo laranja) e ferrita (círculo vermelho) conforme pode ser observado na figura 16.

Figura 16 - Microestrutura do aço AHSS DP800 como recebido



DEMEC \ CTG

Fonte: A autora, 2019.

A aplicação de difração de raio-x no material como recebido (figura 16) confirmou as fases presentes na microestrutura da figura 26 e o método de Rietveld foi aplicado para quantificar as fases através da utilização do software Xpert High Score Plus que será apresentado posteriormente.

5.2 IDENTIFICAÇÃO DOS DIFERENTES DOMÍNIOS DE TRANSFORMAÇÃO DE FASE UTILIZANDO A DILATOMETRIA

A técnica de dilatometria é utilizada no estudo para transformações de aços, quando esta ocorre no estado sólido. As curvas de dilatação fornecem o aumento do volume atômico, indicando os diferentes domínios de transformação de fase.

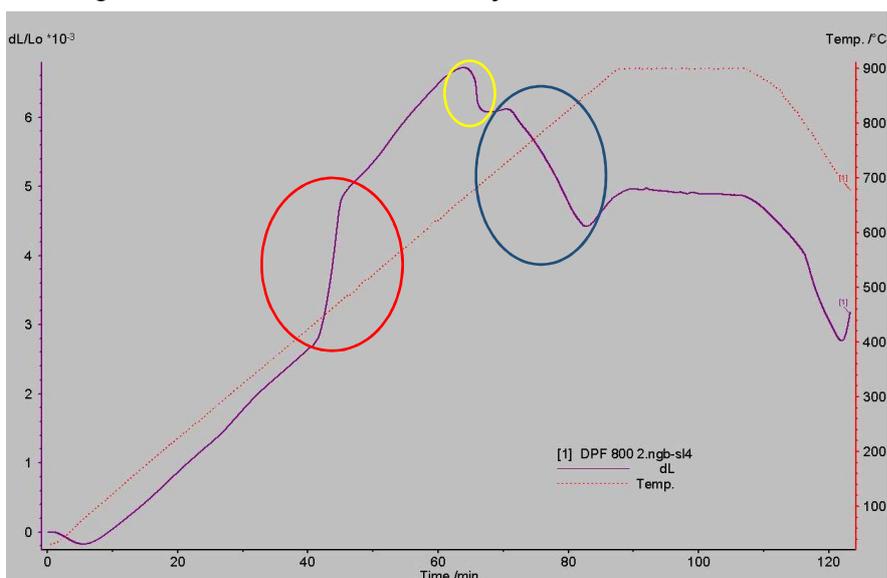
Neste estudo observou-se acidentes sobre a curva dilatométrica em três regiões (figura 17).

Região 1(em vermelho): temperatura entre 450°C e 470°C, transformação da bainita em ferrita.

Região 2(em amarelo): temperatura de 650°C e 700°C, dissolução de carbeto

Região 3(em azul): temperatura entre 715°C e 850°C transformação da ferrita em austenita.

Figura 17 - Curva de dilatometria Aço Dual Phase DP-800



Fonte: A autora, 2019.

5.3 REALIZAÇÃO DAS SEQUÊNCIAS TÉRMICAS E TERMOMECÂNCIAS BASEADOS NO ENSAIO DILATOMETRICO

Os tratamentos termomecânicos em aços são aplicados para uma melhoria de resistência mecânica através da deformação em altas temperaturas seguida de mudança das fases produzidas a partir de processos industriais de conformação plástica, como por exemplo a extrusão, laminação ou o forjamento.

Deformações plásticas interfere nas cinéticas das transformações modificando as curvas do diagrama TTT, aumentando a taxa de nucleação nas regiões que foram afetadas pela deformação plástica. As transformações de fases ocorrem preferencialmente nos contornos de grãos levando em consideração o ponto de vista energético (FERREIRA, 2002).

As sequências térmicas e termomecânicas utilizadas neste estudo são constituídos pelas seguintes combinações (tabela 2):

Tabela 2 - Sequências térmicas e termomecânicas

Sequência	Temperatura (°C)	Tempo (min)	
		15(min)	30(min)
Térmica	450°C	C (450-15)	
	600°C	C (600-15)	C (600-30)
Termomecânica	450°C	L (450-15)	
	600°C	L (600-15)	L (600-30)

Fonte: A autora, 2019.

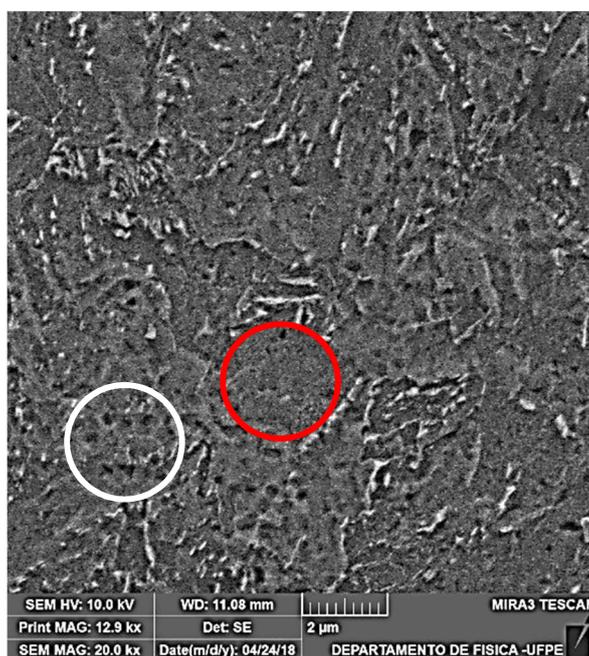
As transformações de fase produzidas nas diferentes sequências revelaram fases distintas como bainita, ferrita e microconstituintes MA em diferentes concentrações. As temperaturas utilizadas na decomposição isotérmica estão de acordo com o ensaio dilatométrico.

5.4 CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL APÓS TRATAMENTOS TÉRMICOS, IDENTIFICANDO AS MICROESTRUTURAS OBTIDAS

A análise micrográfica foi realizada para identificar as microestruturas existentes nas amostras tratadas nas diferentes sequências térmicas e termomecânicas. Nas figuras 18 a 20 e 22 a 24 foram observadas diferentes microconstituintes como a ferrita, bainita, austenita retida, e microconstituintes MA em baixíssimo teor.

A figura 18 é uma micrografia obtida a partir da sequência termomecânica L (450-15) da amostra austenitizada durante 20 minutos, laminada a quente com redução de 10% e decomposição isotérmica a 450°C em banho de chumbo por 15 minutos. Através dessa figura, é possível observar que a estrutura predominante é a ferrita (círculo vermelho). Observa-se também nesta imagem a bainita como outro microconstituente (círculo branco).

Figura 18 - Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência termomecânica L (450-15)

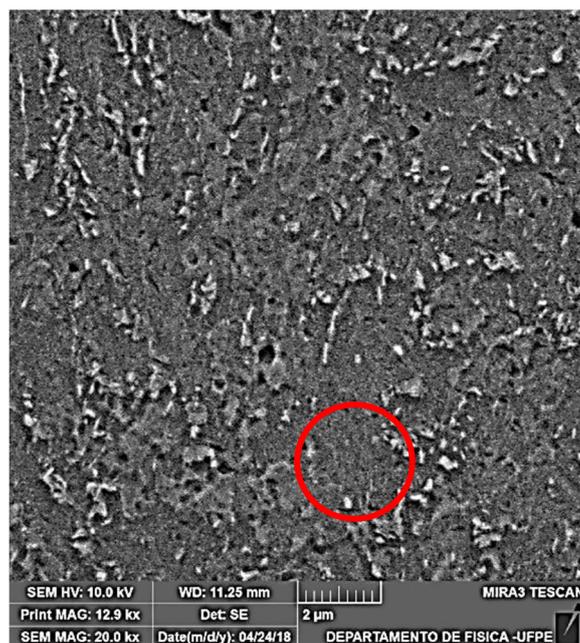


Fonte: A autora, 2019.

A figura 19 mostra o material onde foi aplicada a sequência térmica C (450-15) da amostra austenitizada durante 20 min e decomposição isotérmica a 450°C em banho de chumbo por 15 minutos. Observam-se microconstituintes de forma muito similar

com a figura anterior. Entretanto, a ferrita na figura 19 apresentou menores concentrações conforme será ratificado no item 5.7. Este resultado se justifica pelo fato de a deformação ter acelerado a cinética de decomposição isotérmica da ferrita (círculo vermelho)

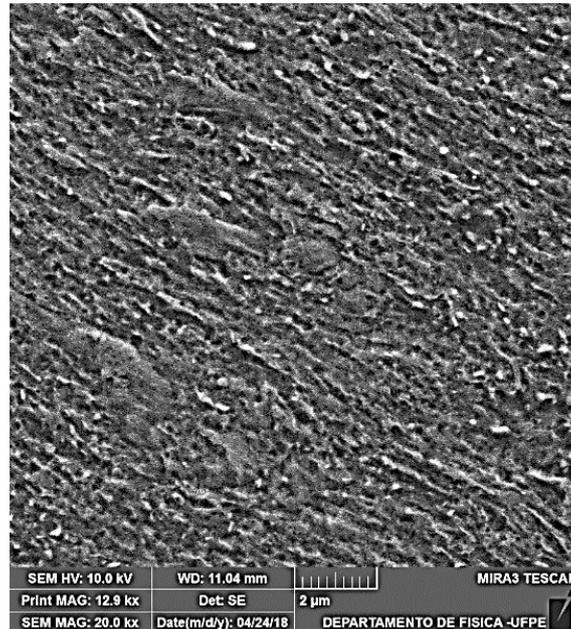
Figura 19 - Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência térmica C(450-15)



Fonte: A autora, 2019.

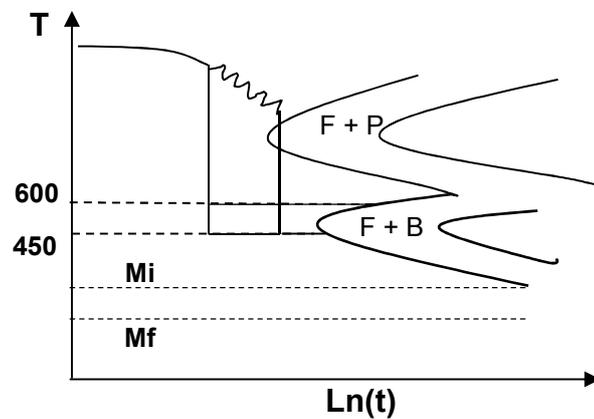
A figura 20 mostra a micrografia obtida a partir da sequência térmica L(600-15) da amostra austenitizada durante 20 minutos, laminada a quente com redução de 10% e decomposição isotérmica a 600°C em banho de chumbo por 15 minutos. Observa-se uma quantidade de ferrita menor que a quantidade observada na sequência L (450-15). Este resultado se justifica, provavelmente, pelo fato da solução sólida resultante do resfriamento, após laminação, estar numa temperatura maior e ter um tempo menor para decomposição isotérmica dentro do domínio ferrítico-bainítico, conforme sugerido na figura 21. Todas as frações volumétricas de cada fase serão mostradas no item 5.7, onde os valores foram obtidos através do Método de Rietveld.

Figura 20 - Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800Dual Phase após sequência termomecânica L(600-15)



Fonte: A autora, 2019.

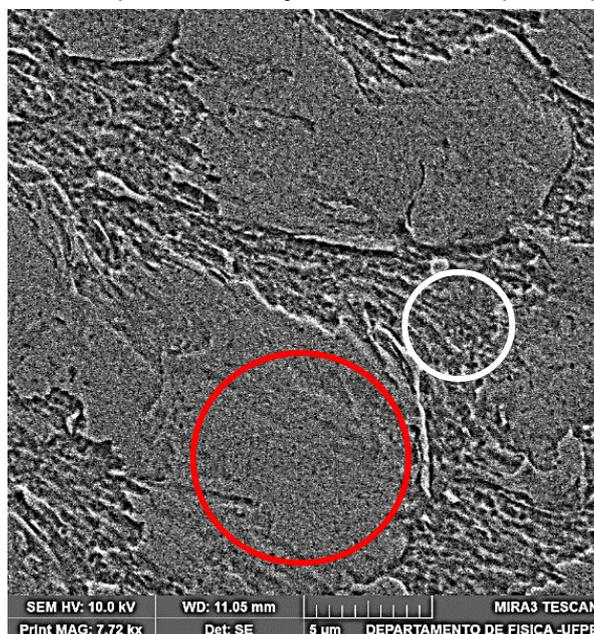
Figura 21 - Diagrama TTT hipotético para o aço DP800



Fonte: A autora, 2019.

A figura 22 mostra a microestrutura obtida pela sequência térmica C(600-15) da amostra austenitizada durante 20 min e decomposição isotérmica a 600°C em banho de chumbo por 15 minutos. onde em alto relevo evidencia-se a fase ferrita (círculo vermelho) ladeada de bainita (círculo branco) por todos os lados.

Figura 22 - Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência térmica C(600-15)



Fonte: A autora, 2019

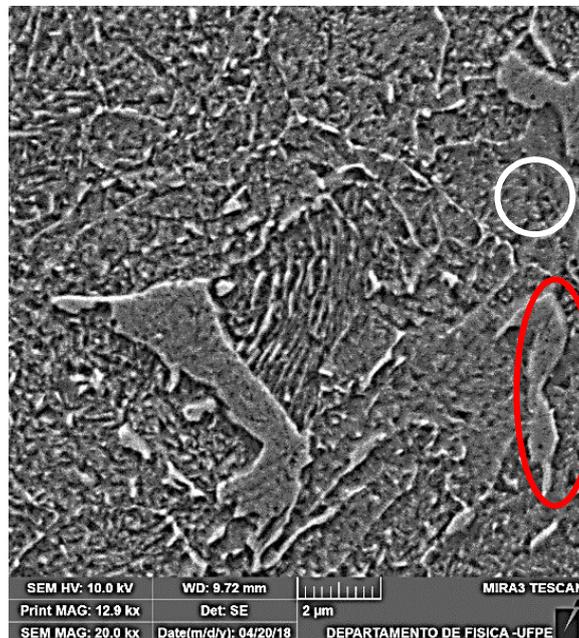
Nesta microestrutura observa-se a ferrita poligonal (círculo vermelho), ladeada pela bainita em baixo relevo. Podemos ainda observar o contorno da ferrita (na região mais clara) ainda contém austenita residual, em baixíssima fração volumétrica. É conveniente ressaltar que, devido às baixíssimas frações volumétricas, tanto a austenita retida quanto o constituinte MA não pode ser detectado por difração de Raio-x.

A bainita apresenta-se comumente com a morfologia acicular devido aos seus mecanismos de transformação: cisalhamento, como numa transformação martensítica, seguido de difusão para precipitação do carbeto. Neste estudo, a bainita tem se apresentado sempre em baixo relevo. Por outro lado, a ferrita que se decompõe diretamente da austenita, em diferentes domínios de transformação, pode apresentar variações morfológicas, conforme veremos adiante.

A figura 23, obtida a partir da sequência termomecânica L(600-30) da amostra austenitizada durante 20 minutos, laminada a quente com redução de 10% e decomposição isotérmica a 600°C em banho de chumbo por 30 minutos mostra uma microestrutura constituída majoritariamente por bainita (círculo branco), por ferrita

(elipse vermelha) no interior da qual observa-se uma subestrutura lamelar e por austenita retida em baixíssima fração volumétrica.

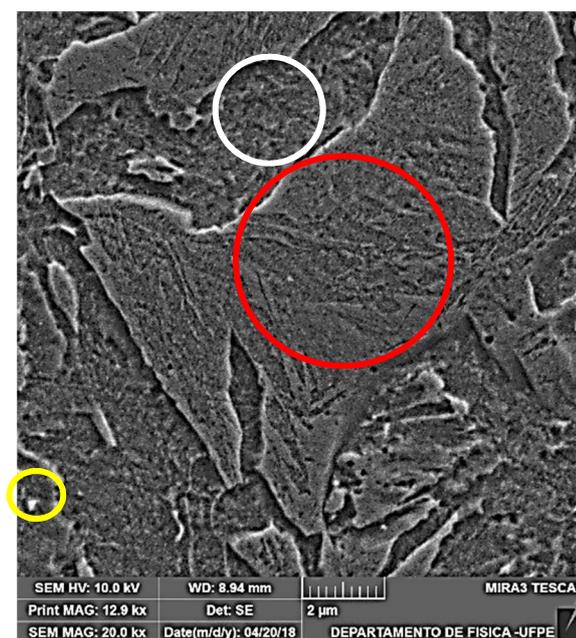
Figura 23 - Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 após sequência termomecânica L(600-30)



Fonte: A autora, 2019.

A figura 24 é uma microestrutura obtida pela sequência térmica C(600-30) da amostra austenitizada durante 20 min e decomposição isotérmica a 600°C em banho de chumbo por 30 minutos, mostra majoritariamente a fase ferrítica (círculo vermelho) com a bainita (círculo branco) no entorno. Ressaltamos que a fase ferrítica apresenta morfologia híbrida lamelar- Widmanstätten, indicando que este microconstituente foi formado, tanto no domínio de alta (Widmanstätten) quanto no de baixa (lamelar) temperaturas. É possível observar-se ainda um pequeno teor de austenita residual (cinza claro na região de círculo vermelho), assim como algumas minúsculas partículas do constituinte MA (círculo amarelo).

Figura 24 -Microestrutura por MEV do aço AHSS DP800 C após sequência térmica (600-30)



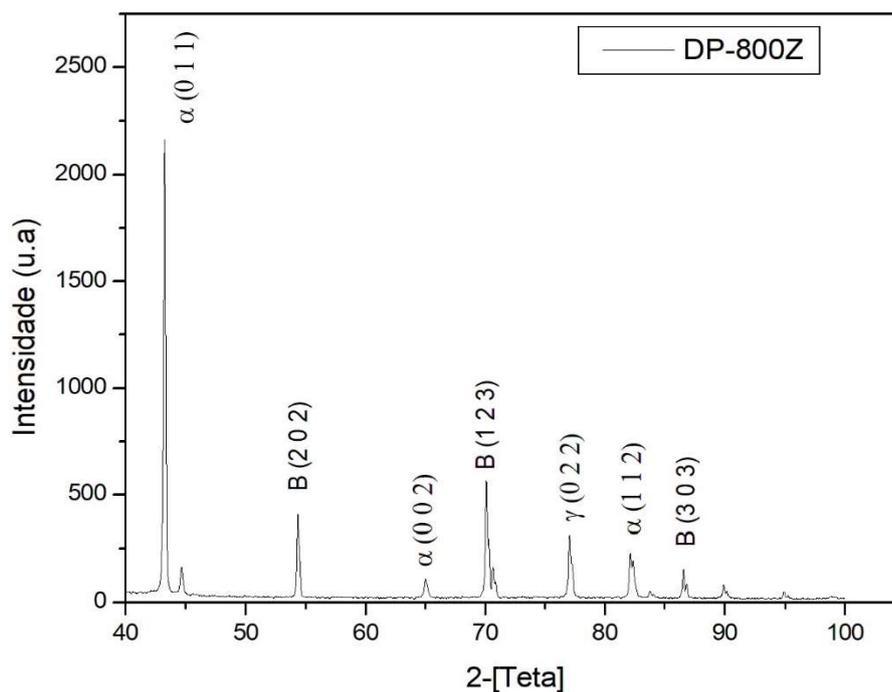
Fonte: A autora, 2019.

5.5 DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DAS MICROESTRUTURAS OBTIDAS NA SEQUÊNCIA DO ITEM 4.2.4

Na Figura 25 se encontra um difratograma típico para este tipo de aço multifásico para 2θ variando entre 40° e 100° .

Os difratogramas que serão mostrados a seguir apresentam as análises realizadas no aço Dual Phase 800 nas condições de “como recebido” e decompostos em condições isotérmicas, sem deformação (térmico) e com deformação (termomecânico), assim como foi feito no estudo para caracterização microestrutural. Na realidade, os resultados da difração de Raios-x servem para identificação das fases presentes, ratificando as análises microestruturais, e servirão também como base para quantificação das frações volumétricas. A análise foi realizada buscando-se as condições de difração de Bragg para obtenção dos valores de distância interplanar (d) em função dos ângulos de varredura (2θ). Baseados nos Padrões de Difração COD que estão resumidos no anexo A, foram identificadas as fases ferrita, bainita, austenita retida, com frações volumétricas que dependiam das condições de tratamento.

Figura 25 - Difratoograma da amostra como recebido- Aço AHSS DP800

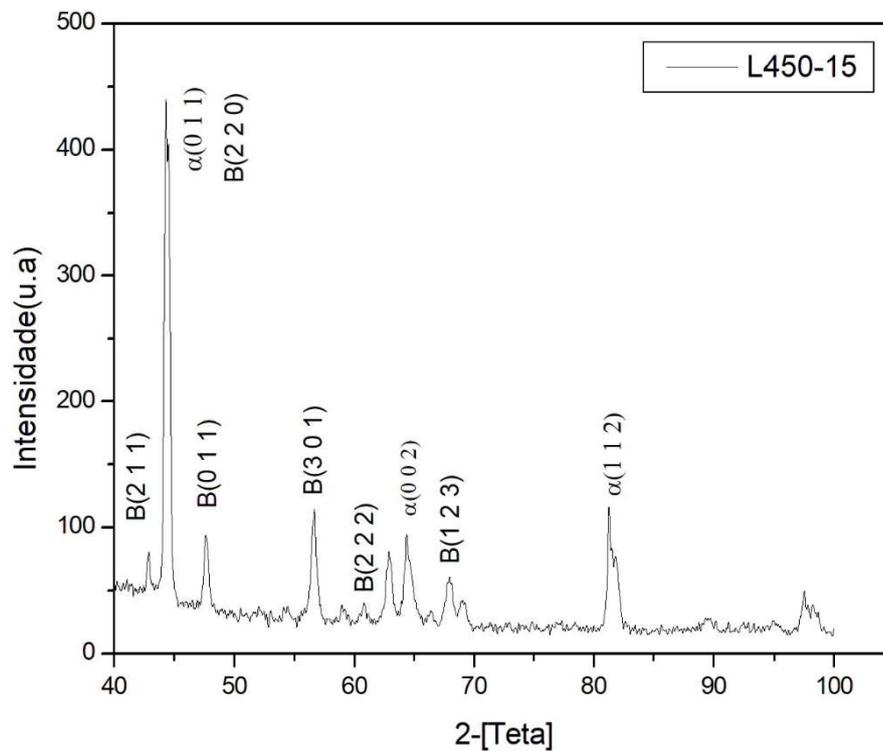


Fonte: A autora, 2019.

Conforme descrição acima, baseados nas posições angulares foram observadas, de acordo com padrões COD, as fases austenita (retida), ferrita e bainita. Pelo fato de alguns picos possuírem pequenas intensidades, uma quantidade pequena de erro pode ser considerada nos ensaios.

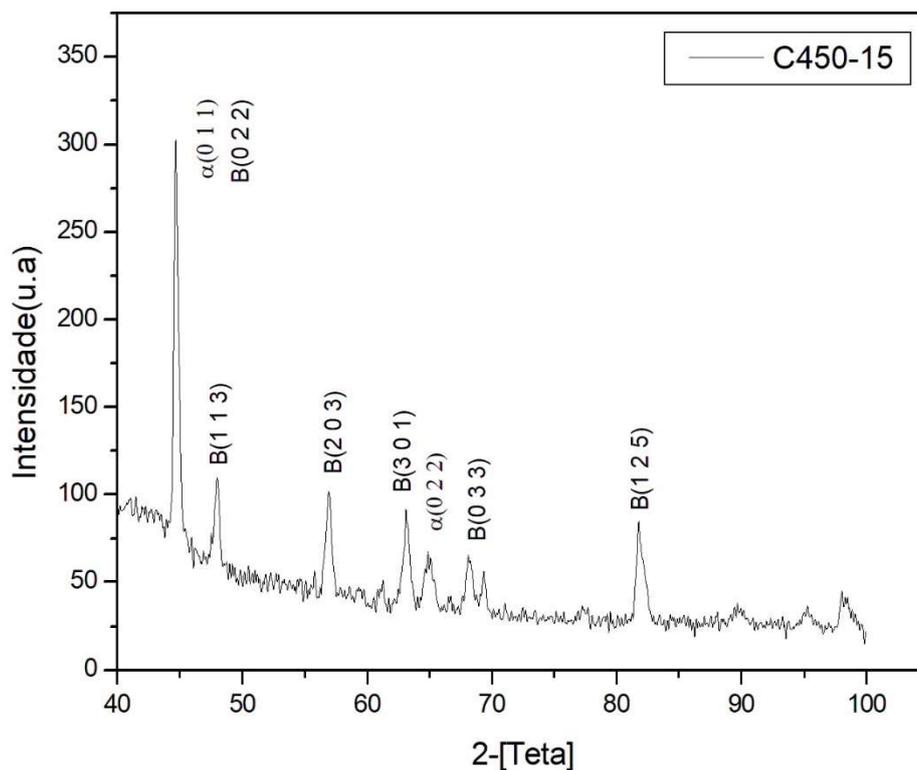
As imagens abaixo mostram, para diferentes condições de tratamento L(450-15) e C(450-15), os picos difratados para um intervalo angular (2θ) compreendido entre 40 e 100° em ambas as amostras (figuras 26 e 27).

Figura 26 - Difratoograma aço AHSS DP800 + laminação a quente e decomposição térmica a 450°C por 15 minutos (L450-15)



Fonte: A autora, 2019.

Figura 27 -Difratoograma aço AHSS DP800 após decomposição termomecânica a 450°C por 15 minutos (C450-15)

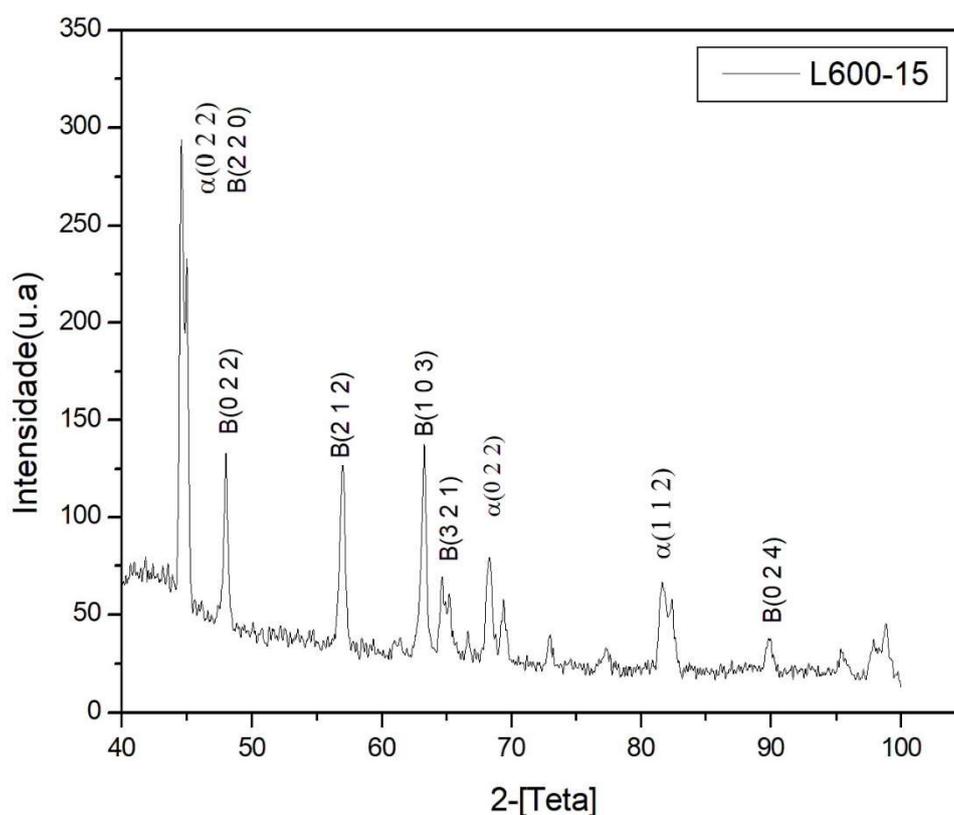


Fonte: A autora, 2019.

Nestas figuras se observa que o pico de maior intensidade, correspondente ao plano $\alpha(011)$ da ferrita (figura 26), que diminui conforme a mudança de sequência térmica para a condição C (450-15) (figura 27); caracterizando a influência da deformação na cinética de decomposição.

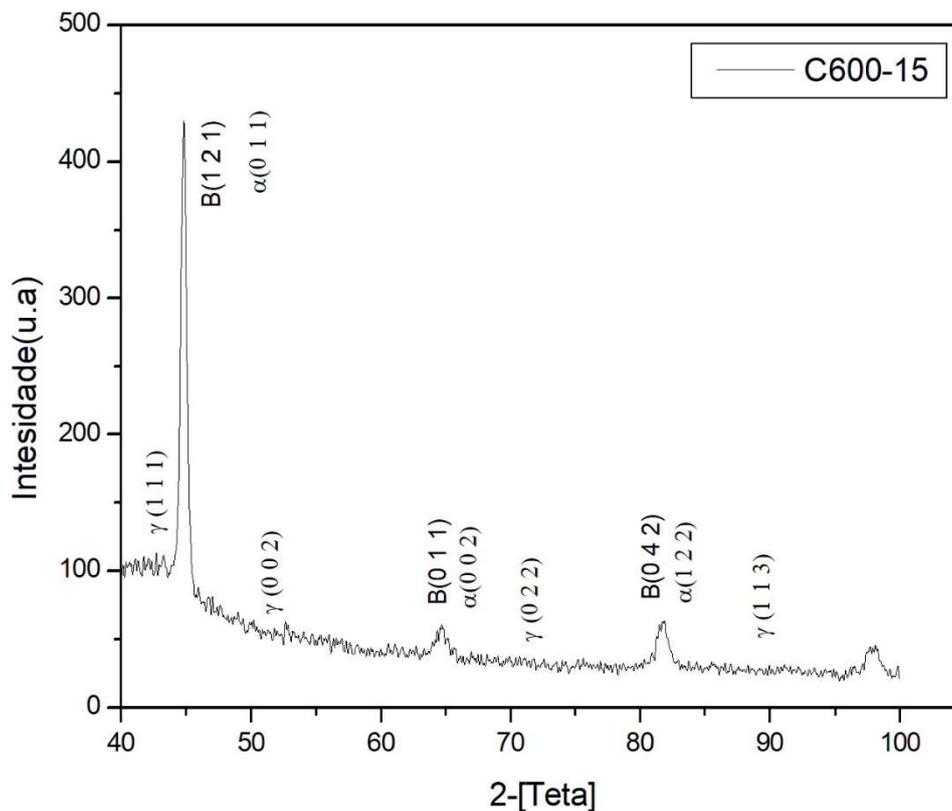
A precisão do método de quantificação por DRX é considerada satisfatória, muito embora alguma incerteza também possa ser gerada, como nos casos em que haja superposição ou justaposição de raias difratadas (picos) de diferentes fases. Como exemplo, temos a superposição das raias (picos) difratadas $\alpha(002)$ com B (321) e a raia $\alpha(112)$ justaposta com outra raia da austenita retida. Na figura 28 estão mostradas estas fases sobrepostas e justapostas e seus respectivos picos de difração.

Figura 28 - Difratograma aço AHSS DP800 após laminação a quente +decomposição a isotérmica em banho de chumbo a 600°C por 15 minutos



Na figura 29, referente amostra a submetida à sequência C(600-15), mostra os picos de difração referentes aos planos das fases ferrita (α) e para bainita (B).

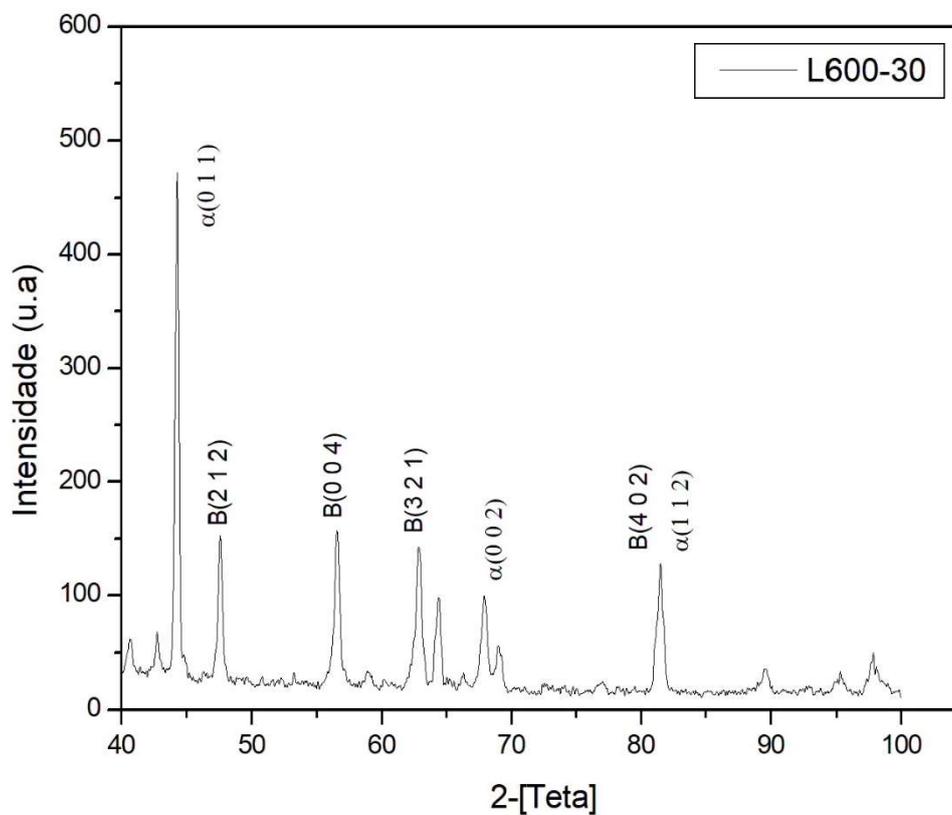
Figura 29 - Difratoograma aço AHSS DP800 após decomposição isotérmica a 600°C por 15 minutos



Fonte: A autora, 2019.

A figura 30, referente a amostra submetida à sequência L(600-30), mostra os picos de difração referentes aos planos das fases ferrita (α) e para bainita (B). Os picos de baixa intensidade, não identificados, referem-se à fase austenita retida.

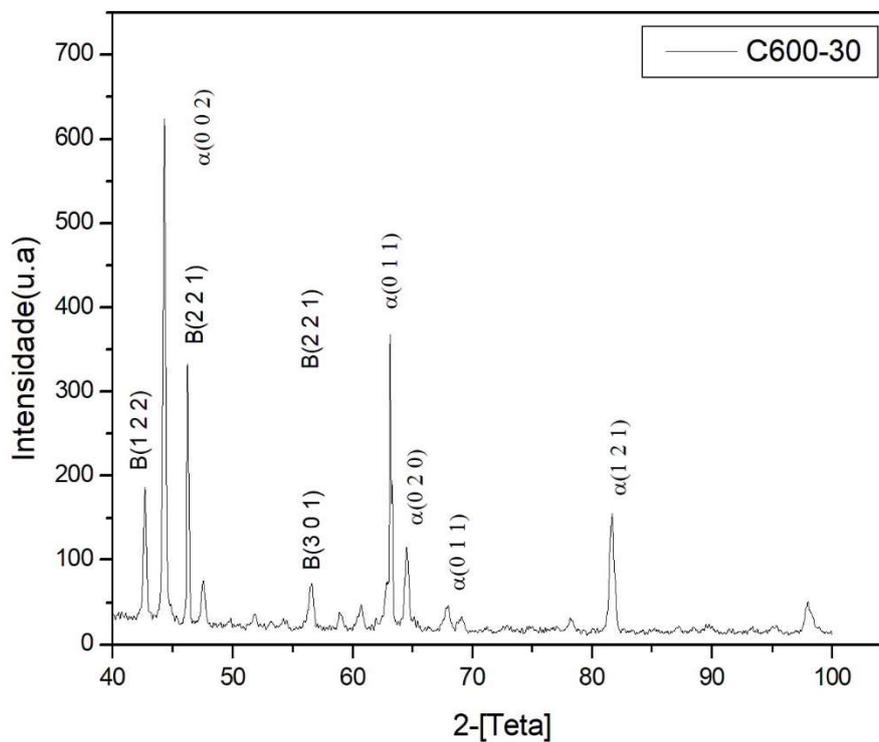
Figura 30 - Difratograma aço AHSS DP800 após laminação a quente +decomposição a isotérmica em banho de chumbo a 600°C por 30 minutos



Fonte: A autora, 2019.

A figura 31, referente a amostra submetida à sequência C(600-30), mostra os picos de difração referentes aos planos das fases ferrita (α) e para bainita (B). Assim como já foi dito em relação ao difratograma anterior, os picos de baixa intensidade são relativos à austenita retida.

Figura 31 - Difratoograma aço Dual Phase após decomposição isotérmica a 600°C por 30 minutos



Fonte: A autora, 2019.

Chamamos a atenção para o fato de que o constituinte MA não pode ser detectado por difração de Raio-x, devido sua baixíssima fração volumétrica. É sabido que fases cujas frações são inferiores a 5% não são detectadas por difração convencional. É necessário realizar-se a difração com detectores de baixo ângulo.

5.6 ENSAIO MECÂNICO DO MATERIAL TRATADO TÉRMICA E TERMOMECHANICAMENTE NA SEQUÊNCIA DO ITEM 5.4

Para avaliar os efeitos dos tratamentos térmicos e termomecânicos aplicados às amostras, foram realizados ensaios de tração para se determinar as propriedades mecânicas. Na tabela 3 estão listadas as informações obtidas após realizados os ensaios, o desvio padrão observado foi de 12,27 MPa.

Tabela 3 - Propriedades mecânicas do aço Dual Phase DP800

Condição da amostra	Limite de resistência (MPa)	Alongamento (%)
DPZ800	800	20,5
1 (L450-15)	905,52	8,5
2 (C450-15)	769,20	6,5
3 (L600-15)	711,11	10,5
4 (C600-15)	846,73	11,5
5 (L600-30)	646,98	15,5
6 (C600-30)	789,07	16

Fonte: A autora, 2019.

De acordo com a tabela acima, podemos afirmar que as únicas sequências empreendidas que produziram aumento da resistência foram a L (450-15) e a C(600-15). Este resultado torna evidente que a deformação plástica que antecede o resfriamento rápido evidencia um aumento na resistência quando a decomposição isotérmica é realizada em baixas temperaturas, pouco acima de Ms. Entretanto, estas sequências apresentaram uma redução significativa no alongamento; algo em torno de 50% do valor do material (20,5%) na condição de “como recebido” (DPZ800). Apenas as sequências realizadas em tempos maiores como L (600-30) e C (600-30) produziram alongamento satisfatório.

Sequências térmicas semelhantes às empregadas neste estudo já foram utilizadas por (PEDROSA *et al.*,2013;CASTRO *et al.*,2013) para aumentar as propriedades mecânicas em aços de alta resistência. Neste estudo, esses autores

aumentaram o limite de resistência de 80 KPSI para 120 KPSI.(GAO et al.,2013) aplicaram três rotas de tratamento térmico de um aço trifásico assistido por TRIP, onde a bainita foi produzida a partir da decomposição da austenita. Os resultados mostraram que após o tratamento uma boa combinação de resistência e ductilidade foi alcançada com limite de resistência de 1688 MPa e 25,2% de alongamento.

As figuras 32 a 36 mostram os diagramas de tensão versus deformação para todas as amostras citadas na tabela 3.

Figura 32 - Diagrama tensão x deformação na amostra L(450-15)

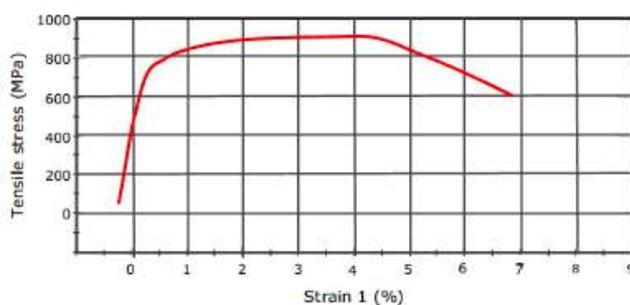


Figura 33 - Diagrama tensão x deformação na amostra C(450-15)

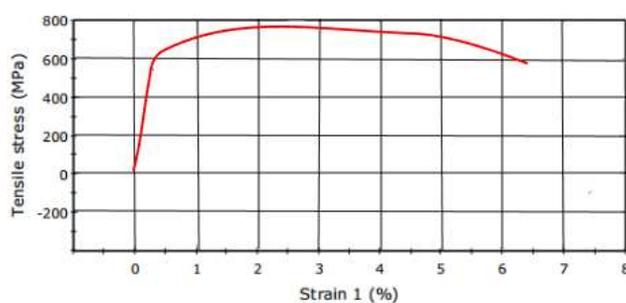


Figura 34 - Diagrama tensão x deformação na amostra L(600-15)

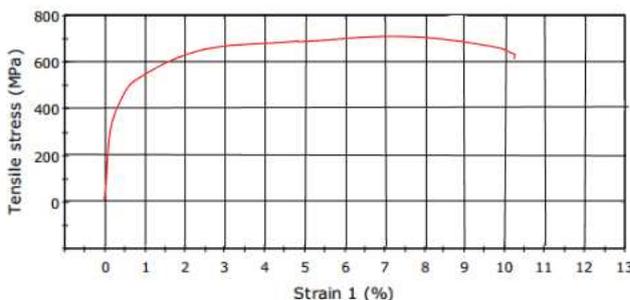
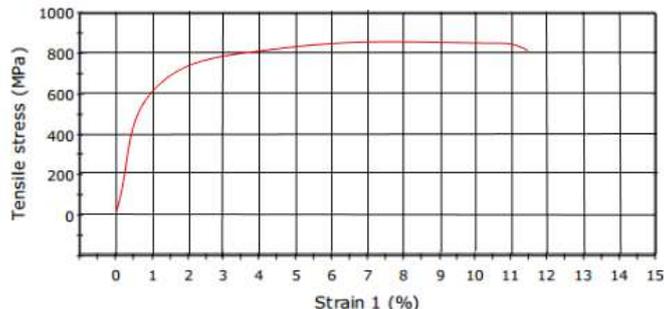
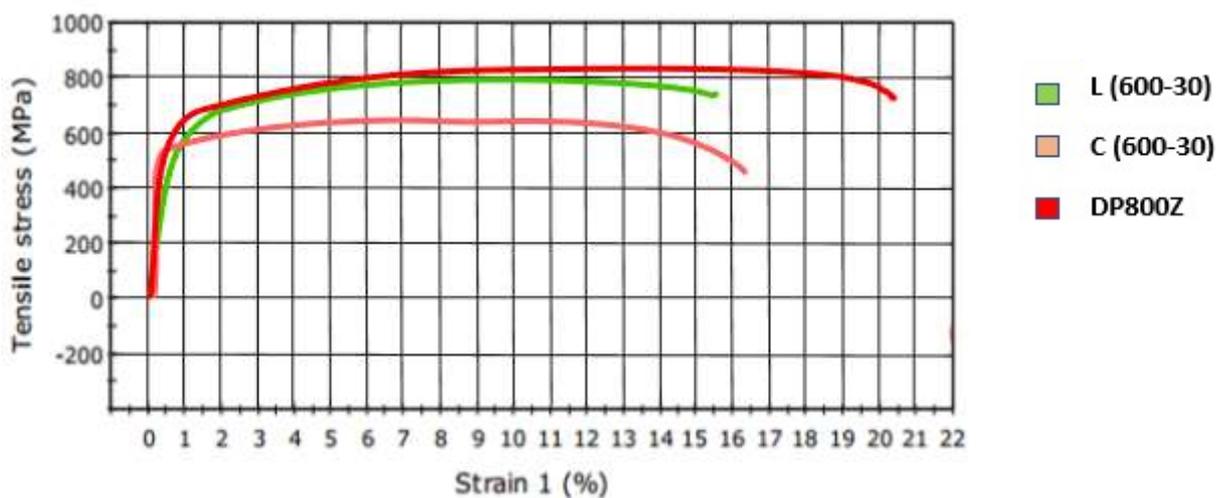


Figura 35 - Diagrama tensão x deformação na amostra C(600-15)



Fonte: A autora, 2019.

Figura 36 - Diagrama tensão x deformação na amostra L(600-30) e C(600-30)



Fonte: A autora, 2019.

Na figura 36, é feita uma comparação do material submetido a duas sequências produzidas a 600°C, com o material na condição de como recebido. A linha em marrom descreve a curva tensão x deformação para o material quando aplicada a austenitização à 900°C, seguido de laminação a quente, com posterior resfriamento brusco para decomposição isotérmica a 600°C, que foi designada neste trabalho por L(600-30). A linha em verde descreve a curva tensão x deformação do material numa sequência C(600-30) com decomposição na mesma temperatura, mas sem deformação. Comparando-se estas duas sequências (linha marrom e linha verde) com a linha vermelha do material na condição de “como recebido” observa-se que, além da menor resistência, os alongamentos de 15,5 e 16%, respectivamente, também são inferiores a condição inicial, onde o alongamento foi de 20,5%.

5.7 QUANTIFICAÇÃO DE FASES EM CADA UMA DAS SEQUÊNCIAS TÉRMICAS (SEM DEFORMAÇÃO) E TERMOMECAÑICAS (COM DEFORMAÇÃO)

Para a quantificação das fases existentes nas microestruturas como indicada nas figuras do item 5.4, uma análise por difração de Raio-x foi aplicada em todas as amostras. Levou-se em consideração a aplicação ou não de deformação plástica no material que pode produzir um deslocamento ou alargamento na base dos picos

difratados, quando comparados com picos gerados por um material sem deformação plástica.

Para a quantificação de fases presentes nas amostras, o método leva em consideração, a ocorrência, ou não, de superposição ou justaposição de picos difratados. Isto mostra uma certa robustez nas análises mesmo diante da complexidade pelo fato de o material possuir múltiplas fases.

Após a deformação aplicada por laminação a quente o refinamento do grão está associado a recristalização da austenita. Quando a laminação ocorre abaixo da temperatura de não recristalização, os grãos austeníticos tornam-se mais alongados e os defeitos apresentam-se de forma intragranular. Esses defeitos podem induzir a transformação da austenita-ferrita durante o resfriamento. (YUE, 2005) (DIETER; KUHN; SEMIANTIN, 2003).

A relação de Hall-Petch é ligeiramente diferente para o caso dos aços bifásicos, onde o caminho livre para o deslocamento das discordâncias é delimitado pelos contornos austenítico-ferrítico, e não simplesmente pelos contornos de grão ferríticos (GORNI, 2018). Já foi demonstrado experimentalmente que a equação de Hall-Petch só tem validade em casos dinâmicos, se o valor do tamanho de grão (d) for substituído pela distância livre ferrítica média. (GORNI e BRANCHINI, 1992). Entretanto, por dificuldades operacionais, neste trabalho o comportamento mecânico não pode ser justificado pelo tamanho do grão. Porém, ficou evidente que a deformação em alta temperatura pode acelerar a transformação da austenita em ferrita quando seguida de resfriamento acelerado. Este resfriamento acelerado favorece a nucleação da ferrita nos contornos e no interior do grão austenítico. (SHANMUGAM *et al.*, 2007).

Um controle na velocidade de resfriamento, aplicado posteriormente a uma laminação a quente, pode modificar a microestrutura final produzida por decomposição isotérmica. Nestes casos as fases finais podem ser ferrita+perlita (transformação com difusão) e ferrita +bainita (Transformação com cisalhamento e difusão) (SIWECKI, 1992).

Trabalhando com um aço de baixo carbono como este AHSS,(CASTRO *et al.*,2014) e (BHADESHIA, 1999) encontraram morfologia similar para ferrita e bainita (ferrita acicular) em uma decomposição isotérmica de austenita a 400°C.

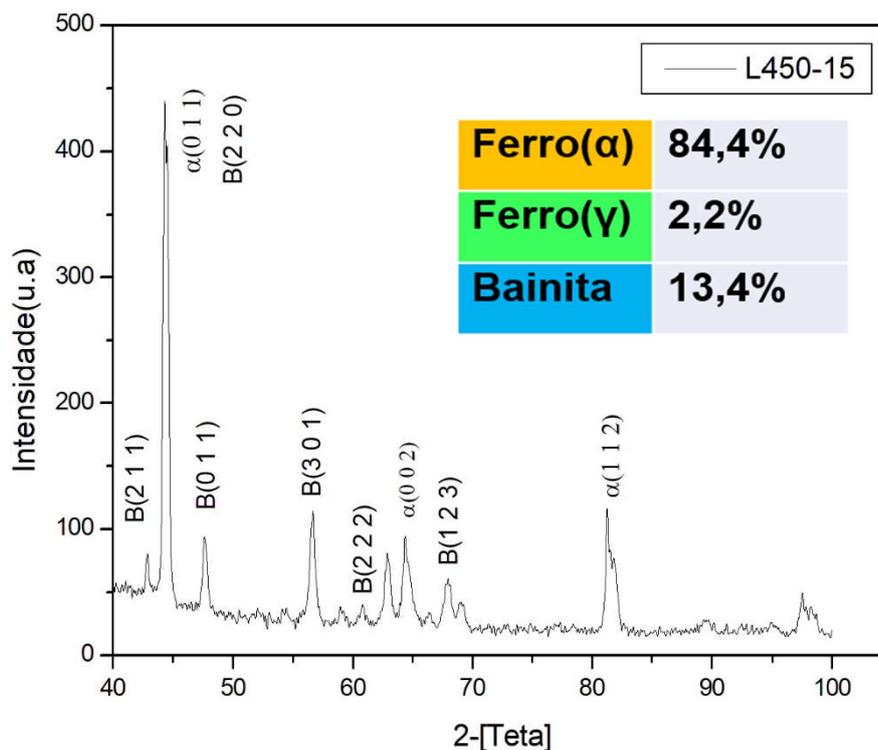
Outros autores, trabalhando com outras ferroligas de baixo carbono (<0,10% C), encontraram morfologias equivalentes para a bainita, semelhantes às

encontradas nos aços AHSS (R.Y. ZHANG, 2010; K. FUJIWARA, 1995; SHANMUGAM *et al.*, 2007; J.R. YANG, 1995 ;C.H. LEE, 2003). A decomposição da austenita previamente deformada pode produzir bainita tanto a partir dos limites dos grãos quanto dentro do grão (precipitação intragranular), como observado (R.Y. ZHANG, 2010). Dependendo do teor de carbono da liga, podem apresentar-se como bainita convencional (CB) ou ferrita acicular (FA) para ligas com menor teor de carbono (0,03-0,07% C) e adição de Nb, V ou Ti (CASTRO *et al.*,2014); (BHADESHIA, 1999).

Bainita convencional(CB) cresce como pacotes de ripas de ferrita paralelas, com o carboneto precipitado no contorno (bainita superior) ou no interior das ripas (bainita inferior). No entanto, ferrita acicular (F) é formado como slats de ferrite distribuídos aleatoriamente, que são muito mais finos que a bainita convencional (CB). Certamente, a ferrita acicular (FA) pode ser formada tanto na austenita previamente deformada quanto na austenita não deformada. Ambas as microestruturas de CB e AF são formadas por mecanismos de cisalhamento seguidos de difusão (BHADESHIA, 1999; LEE,BHADESHIA e LEE, 2003;.THOMPSON,COLVIN e KRAUSS,1990).

Nas amostras que foram aplicadas laminação a quente seguida por resfriamento acelerado e posterior decomposição isotérmicas apresentaram uma maior quantidade de ferrita em todas as amostras em comparação com as que não foram aplicadas deformação a quente. A amostra L (450-15) apresentou uma porcentagem de 84,4% de ferrita, 13,4% de bainita e apenas 2,2 % de austenita retida (figura 37).

Figura 37 - Quantificação de fases amostra L(450-15)

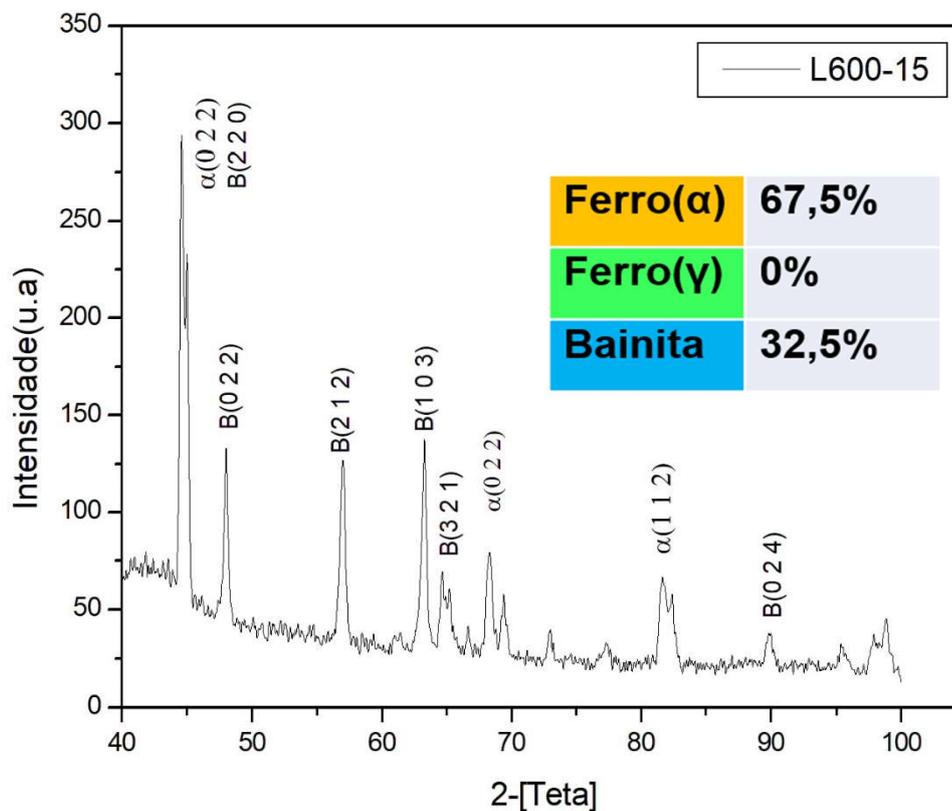


Fonte: A autora, 2019.

MIN *et al.*, (2012) relaciona para o aço tipo bainítico as influências da quantidade de tensão, a temperatura da aplicação da deformação e taxa de resfriamento após deformação na transformação da ferrita e bainita após decomposição isotérmica.

Para a amostra submetida à sequência L(600-15) foi obtida um percentual de ferrita de 67,5% contra 32,5 de bainita, como mostrado na figura 38. Nesta temperatura, toda austenita remanescente do resfriamento rápido foi decomposta.

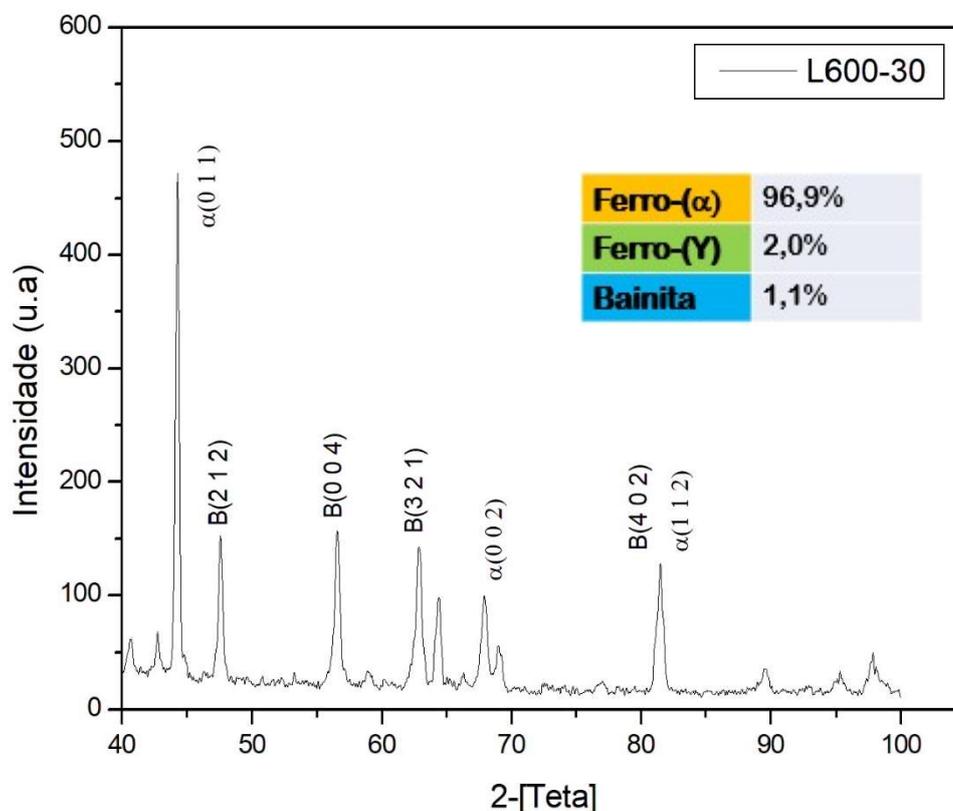
Figura 38 - Quantificação de fases na amostra L(600-15)



Fonte: A autora, 2019.

Para a amostra submetida à sequência L(600-30), foram obtidos os percentuais de 96,9% de ferrita e 3,1% de bainita, como mostra a figura 39. O maior tempo para decomposição nesta temperatura contribuiu para redução no teor de bainita. Este resultado é bastante incoerente com o anterior e com a micrografia deste material tratado nas mesmas condições.

Figura 39 - Quantificação de fases na amostra L600-30



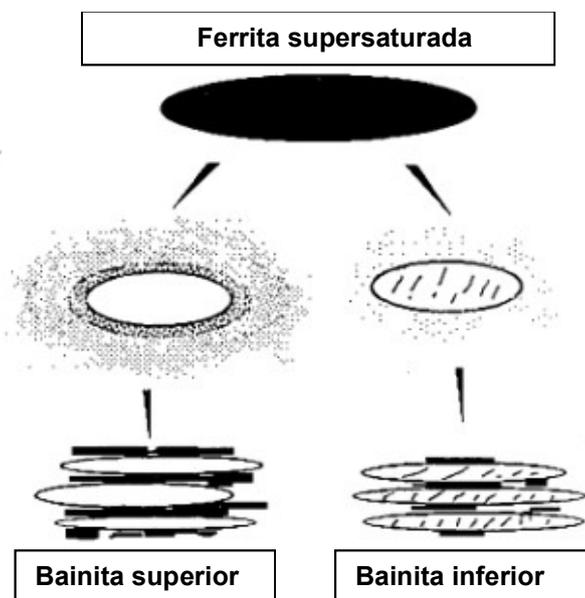
Fonte: A autora, 2019.

Sabe-se que a taxa de nucleação de uma nova fase é função do intervalo de temperatura no qual se afasta um sistema em relação a uma temperatura de equilíbrio (PADILHA, 2007). Entretanto, estas considerações do Padilha não justificam a contradição nos nossos resultados.

A medida que a temperatura de transformação isotérmica é reduzida para valores superiores à temperatura M_s , ocorre a formação da bainita, uma fase metaestável que é formada pela saída de carbeto da solução sólida supersaturada (a ferrita). Em altas temperaturas deste domínio (bainítico) a difusão possibilita a saída total dos carbeto, que precipitam nos contornos da ferrita, formando a bainita superior. Em baixas temperaturas, a difusão não é tão intensa como no caso anterior. Assim sendo, o carbeto não sai totalmente da solução (ferrita) e precipita, principalmente no seu interior, formando a bainita inferior. Segundo Bhadeshia (1990), a bainita superior é constituída pelo carbono rejeitado na formação da ferrita

e possui forma de agulhas ou ripas. A bainita inferior é constituída por plaquetas de ferrita e por carbeto precipitados nessas plaquetas (ver figura 40).

Figura 40 - Ilustração bainita inferior e bainita superior

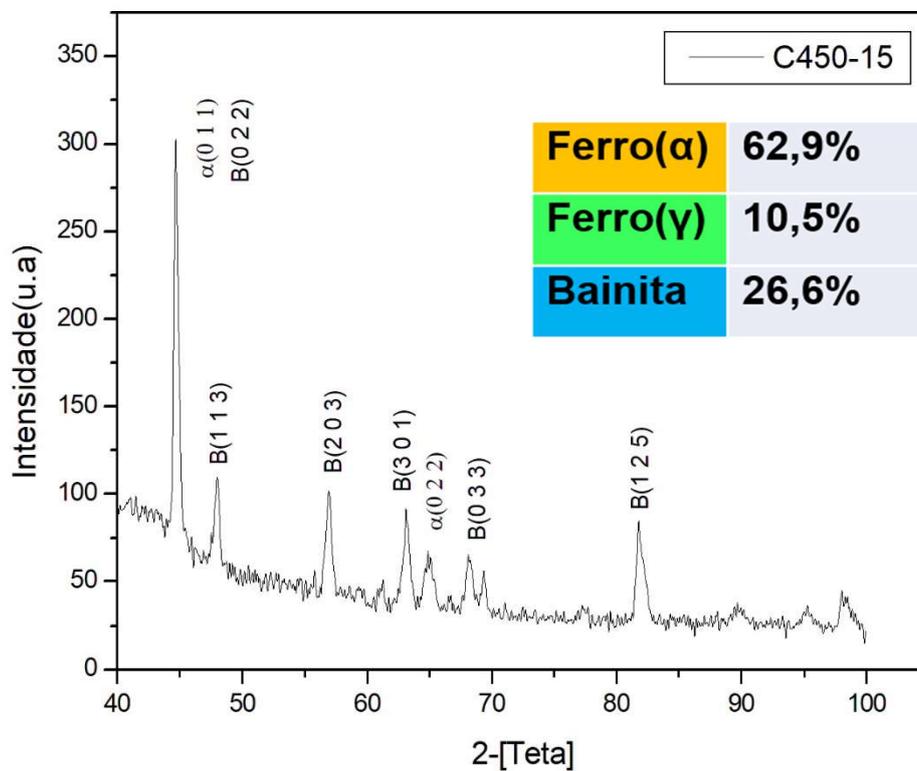


Fonte: Badeshia, 1990.

WU *et al.* (2017) estudou o fenômeno da transformação incompleta da bainita a 400°C e 500°C, para esclarecer o efeito de mecanismo de transformação de bainita. Em particular, o teor de carbono da austenita não transformada foi medido por medições diretas, como sonda de átomos tridimensionais e microanálise por sonda eletrônica de emissão de campo, pelo motivo do tamanho do grão da austenita não transformada entre a ferrita e a bainita ser muito pequeno.

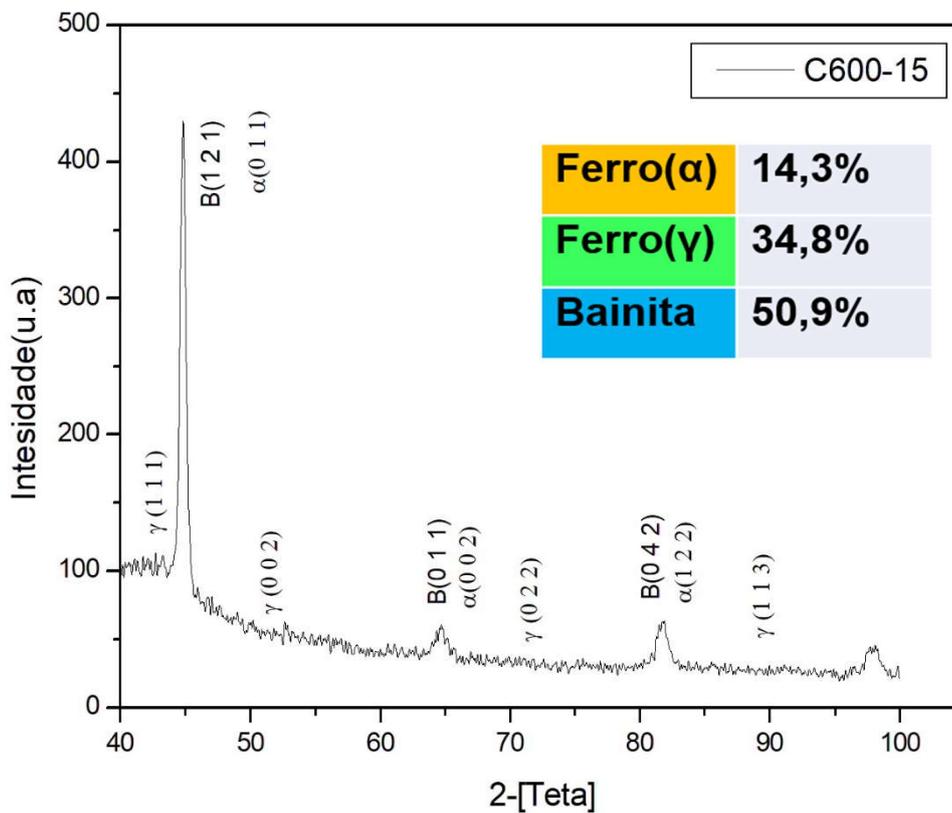
A quantidade de fase bainita obtida nas amostras que passaram apenas por decomposição isotérmica foi consideravelmente maior do que as amostras que passaram por deformação. As figuras 41 a 43 indicam as porcentagens das fases encontrados. Os valores encontrados para as frações foram obtidos pelo método de Rietveld, conforme já descrito no item 4.2.

Figura 41 - Quantificação de fases na amostra C(450-15)



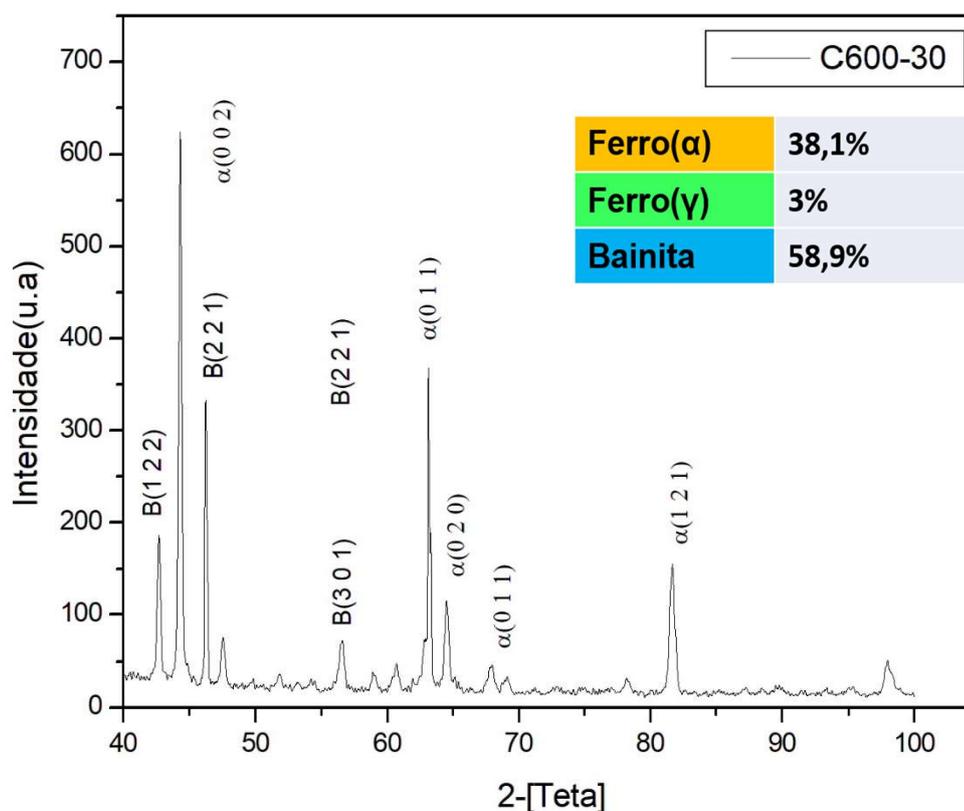
Fonte: A autora, 2019.

Figura 42 - Quantificação de fases na amostra C(600-15)



Fonte: A autora, 2019.

Figura 43 – Quantificação de fases na amostra C(600-30)



Fonte: A autora, 2019.

Estes resultados tornam evidente que se a deformação é indutora da transformação austenita-ferrita, a não deformação contribui para transformação austenita-bainita. O primeiro caso se justifica pelo fato da fase ferrítica já começar a ser formada em alta temperatura, logo após a deformação, no domínio perlítico, conforme sugerido no diagrama esquemático da figura 21. O resfriamento direto, sem deformação, possibilita que a austenita (ainda não transformada) se decomponha num teor maior de bainita.

6 CONCLUSÕES

Diferentes sequências térmicas e termomecânicas, produzidas em duas diferentes temperaturas, 450°C e 600°C, foram estudadas para identificação e quantificação das fases obtidas, bem como para determinação de suas propriedades mecânicas.

- A sequência termomecânica L (450-15) produziu as fases austenita retida, ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 84,4% de ferrita, 2,2% de austenita retida e 13,4% de bainita;
- A sequência térmica C (450-15) produziu as fases austenita retida, ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 62,9% de ferrita, 10% de austenita retida e 26,6% de bainita;
- A sequência termomecânica L (600-15) produziu as fases apenas as ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 67,5% de ferrita e 32,5% de bainita;
- A sequência térmica C (600-15) produziu as fases austenita retida, ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 14,3% de ferrita, 34,8% de austenita retida e 50,9% de bainita;
- A sequência termomecânica L (600-30) produziu as fases austenita retida, ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 96,9% de ferrita, 2% de austenita e 1,1% de bainita.
- A sequência térmica C (600-30) produziu as fases austenita retida, ferrita e bainita que, após quantificação baseada no método de Rietveld revelou 38,1% de ferrita, 3% de austenita retida e 58,9% de bainita.
- De acordo com os experimentos realizados pode-se perceber que as amostras submetidas a sequências termomecânicas apresentaram

uma quantidade de ferrita em maior porcentagem que as amostras não deformadas

- As amostras produzidas por sequências térmicas (sem deformação) apresentaram um maior percentual da fase bainita.
- Apenas as sequências L (450-15) e C (600-15) apresentaram resistência mecânica maior que o material na condição de “como recebido”.
- Nenhuma das sequências térmica ou termomecânica produziu um alongamento de 20,5%, como no material na condição de “como recebido”

REFERÊNCIAS

ARAUJO, S. D. **Avaliação da influência das condições de superenvelhecimento na microestrutura e propriedades mecânicas de um aço bifásico produzido por recozimento contínuo**. Belo Horizonte: UFMG, 2013. p. 82.

ASHBY, M. F. The Deformation of Plastically Non-Homogeneous Materials. **Phil mag**, P.399-424, 1970.

ASTM E8 / E8M-16a, **Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials**. West Conshohocken, PA, 20 Nov. 2016. Disponível em: <https://www.astm.org/Standards/E8.htm>. Acesso em: 20 Nov. 2018.

AYDIN, HUSEYIN *et al.* Development of 3rd generation AHSS with medium Mn content alloying compositions. **Materials Science & Engineering**, Montreal, QC, Canada, p. 501-508, 2013.

BHADESHIA, H. K. D. H. Heat-Treatments in High Strength and Low Alloy Steel. **Materials Science and Engineering**, Cambridge, p. 58-66, 1999.

BHADESHIA, M. T. & H. K. D. H. Model for transition from upper to lower bainite. **Materials Science and Technology**, p. 592-603, 1990.

BHATTACHARYA, D. MICROALLOYED STEELS FOR THE AUTOMOTIVE INDUSTRY. **Tecnol. Metal. Mater. Miner**, p. 371-383, 2014.

CASTRO, R.S. *et al.* Effects of thermomechanical treatment on the occurrence of coincident site lattice boundaries in high strength low alloy steel. **Materials Science & Engineering**, São Carlos, p 1350-1354, 2013.

CASTRO, R.S. *et al.* Obtaining an Acicular Microstructure by Thermomechanical Sequences in X-80 Steel. **Metallurgical and Materials Transactions**, Recife, p. 1-10, 2014.

CHANG, Y. *et al.* Influence of stress on martensitic transformation and mechanical properties of hot stamped AHSS parts. **Materials Science and Engineering**, p. 1-7, 2015.

CHEN, S. *et al.* Correlation o fisothermal bainite transformation and austenite stability in quenching and partitioning steels. **Journal of Iron and Steel Research**, p. 1095-1103, 2017.

DE MOOR, E. *et al.* Effect of retained austenite stabilized via quench & partitioning on the strain hardening of martensitic steels. **Physical Metallurgy and Materials Science**, p. 2586-2595, 2008.

DE MOOR, E. et al. Effect of Si, Al and Mo alloying on tensile properties obtained by quenching and partitioning. **Materials Science and Technology**, Proceedings of the Materials Science and Technology (MS&T), p. 25-29, 2009.

DIETER, G. E.; KUHN, H. A.; SEMIANTIN, S. L. **Hand of workability and processing design**. Ohio, USA: ASM International, 2003.

DOCOL. **Docol DP Dual Phase Steels-Data sheet** GB8201DOCOL. [S. l.], 13 fev. 2014. Disponível em: <https://www.yumpu.com/en/document/read/11500113/datasheet-docol-500-dp-ssab>. Acesso em: 12 abr. 2018.

FERREIRA, R. A. S. **Transformações de fase: aspectos cinéticos e morfológicos**. Recife: UFPE, 2002.

FUJIWARA, K.; OKAGUCHI, S.; OHTANI, H. Effect of Hot Deformation on Bainite Structure in Low Carbon Steels. **J-Stage**, Sumimoto, p. 1006–1012, 1995.

GAO, G *et al.* A carbide-free bainite/martensite/austenite triplex steel with enhanced mechanical properties treated by a novel quenching–partitioning–tempering process. **Materials Science & Engineering**, Beijing, People's Republic of China, p.165-169, 2013.

GORNI, A.A. Antonio **Gorni On Line**. [S. l.], 27 mar. 2017. Disponível em: http://www.gorni.eng.br/Gorni_CCM_Dez2008.pdf. Acesso em: 20 nov. 2018.

GORNI, A. A.; BRANCHINI, O. L. G. Relações microestrutura-propriedades mecânicas em um aço bifásico laminado a quente. In: **Seminário sobre Chapas Metálicas para a Indústria Automobilística**, 1., 1992. São Paulo: Associação Brasileira de Metais. 1992. p. 127-145.

GRAJCAR, A.; KUZIAK, R.; ZALECKI, W. Third generation of AHSS with increased fraction of retained austenite for the automotive industry. **Archives of Civil and Mechanical Engineering**, 12, p. 334-341, 2012.

HEISTERKAMP, FRIEDRICH; CARNEIRO, TADEU. **Niobium: Future possibilities – technology and the market place**. Düsseldorf, Germany, 13 jul. 2015. Disponível em: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.197.7960&rep=rep1&type=pdf>. Acesso em: 14 dez. 2018.

HILDITCH, T. B.; T. DE SOUZA; HODGSON, P. D. Properties and automotive applications of advanced high-strength steels. **Elsevier**, Victoria, p. 9-28, 2015.

HOWARD, S. A.; PRESTON, K. D. **Profile fitting of powder diffraction patterns**. Washington, DC: Mineralogical Society of America, 1989.

KLUG, H. P.; ALEXANDER, L. E. X-Ray Diffraction Procedures. In: KLUG, H. P. A. A. L. E. **X-Ray Diffraction Procedures: for polycrystalline and amorphous materials**. 2nd Edition. New York: Wiley, 1974. v. 2, cap. 4, p. 303-306.

LEE, C.H.; BHADSHIA, H.K.D.H.; LEE, H.-C. Effect of plastic deformation on the formation of acicular ferrite. **Materials Science & Engineering**, Cambridge, UK, p. 249-257, 2003.

MATLOCK, D. K. et al. Recent developments in advanced high strength sheet steels for automotive applications: an overview. **Jestech**, p. 1-12, 2012.

MILLER, R. L. Ultrafine-grained microstructures and mechanical properties of alloy steels. **Metallurgical Transactions**, p. 905-912, 1972.

NASSER, A. et al. Determination of the flow stress of five AHSS sheet materials (DP 600, DP 780, DP780-CR, DP 780-HY and TRIP 780) using the uniaxial tensile and the biaxial Viscous Pressure Bulge (VPB) tests. **Journal of Materials Processing Technology**, 210, p. 429–436, 2010.

NIGRI, EVELYN. Revisão Bibliográfica. *In*: NIGRI, Evelyn. **Estudo exploratório da soldagem por fricção e mistura mecânica de um aço TRIP 800**. 2008. Dissertação (Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais.) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2008. Disponível em: https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/13072/13072_3.PDF. Acesso em: 20 ago. 2018.

PADILHA, A. F.; RIOS, P. R. **Transformações de fase**. São Paulo: Ed. Artliber, 2007.

PEDROSA, I. R. V. *et al.* Study of phase transformations In API 5L X80 Steel in order to increase its fracture toughness. **Material Research**, São Carlos, SP, p. 489-496, 2013.

PICKERING, F. B. **Physical metallurgy and the design of steels**. London: Applied Science Publishers, 1978.

SHANMUGAM, S. *et al.* Effect of cooling rate on the microstructure and mechanical properties of Nb-micro alloyed steels. **Materials Science & Engineering**, Lafayette, LA, p. 335-343, 2007.

SHRIKANT, P. BHAT. Advances in high strength steels for automotive applications. **Arcelor Mittal Global R&D** – East Chicago, 20 mar. 2015. Disponível em: <https://www.autosteel.org/-/media/files/autosteel/great-designs-in-steel/gdis-2008/12--advances-in-ahss-for-automotive-applications.ash>. Acesso em: 12 nov. 2018.

REN, C. et al. Quantification analysis of the heterogeneity of microstructure of dual phase steel. *In*: **International Conference on the Technology of Plasticity**, 2017. Cambridge: Shanghai, 2017. p. 7-22.

SAEIDI, N.; EKRAMI, A. Comparison of mechanical properties of martensite/ferrite and bainite/ferrite. **Materials Science and Engineering**, p. 125–129, 2009.

SASAKI, J. M. **Laboratórios de Raio-X UFC**. [S. l.], 22 nov. 2017. Disponível em: <http://www.raiosx.ufc.br/site/?p=797>. Acesso em: 10 abr. 2018.

SIWECK, T. Modelling of microstructure evolution during recrystallization controlled rolling. **ISIJ International**, Stockholm, Sweden, p. 368-376, 1992.

SPEAKMAN, S. A. **Precision and accuracy agreement indices in HSP. MIT Center for Materials Science and Engineering**, 12 out. 2010. Disponível em: <http://prism.mit.edu/xray/oldsite/RietveldGOF.pdf>. Acesso em: 22 nov. 2018.

SPEER, J. G. *et al.* Analysis of Microstructure Evolution in Quenching and Partitioning Automotive Sheet Steel. **Metallurgical and Materials Transactions**, [S. l.], p. 3591-3601, 2011.

SPEER, J. *et al.* Carbon partitioning into austenite after martensite transformation. **Acta Materialia**, p. 2611-2622, 2003.

SUGIMOTO, K. *et al.* Stretch-flangeability of a high-strength TRIP type bainitic sheet steel. **ISIJ International**, p. 920-926, 2000.

SUGIMOTO, K. *et al.* Ductility and formability of newly developed high strength low alloy TRIP-aided sheet steels with annealed martensite matrix. **ISIJ International**, Nagano, p. 910-915, 2002.

SUGIMOTO, K. *et al.* Ductility and formability of newly developed high strength low alloy TRIP-aided sheet steels with annealed martensite matrix. **ISIJ International**, p. 1357-1362, 2007.

TAMARELLI, C. M. AHSS 101: the evolving use of advanced high-strength steel for automotive applications. **Steel Mark**. Dev. Inst. Michigan, p. 42, 2011.

TAMARELLI, C. M. **The Evolving use of advanced high-strength steels for automotive applications**. [S. l.], 1 mar. 2017. Disponível em: www.autosteel.org. Acesso em: 12 jul. 2018.

THOMPSON, S. W.; COLVIN, D. J.; KRAUSS, G. Continuous cooling transformations and microstructures in a low-carbon, high-strength low-alloy plate steel. **Metallurgical and Materials Transactions**, Colorado, p. 1493–1507, 1990.

YANG, J. R.; HUANG, C. Y.; CHIOU, C. S. Influence of plastic deformation and cooling rates on the constituents of an ultra-low carbon bainitic steel. **J-Stage**, Tokyo, p. 1013–1019, 1995.

YUE, S. **Thermomechanical processing of ferrous alloys**. Ohio: ASM Handbook : Metal working : Bulk Forming, 2005.

ZBIGNIEW, G. *et al.* The effect of the strain rate on the stress- strain curve and microstructure of AHSS. **Journal of Materials Processing Technology**, 242, p. 246–259, 2017.

ZHANG, R. Y.; BOYD, J. D. Bainite Transformation in Deformed Austenite. **Metallurgical and Materials Transactions Metall**, Ontário, p. 1448-1459, 2010.

ZHAO, K. et al. Influence of rapid cooling pretreatment on microstructure and mechanical property of hot stamped AHSS part. **Journal of Materials Processing Technology**, 228, p. 68-75, 2016.

ANEXO A - DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – DPZ800

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha
 Compound name: Iron-alpha
 Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2,00}

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
 Space group: I m -3 m
 Space group number: 229

a (Å): 2,8660
 b (Å): 2,8660
 c (Å): 2,8660
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88
 Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Metallic
 User Mineral
 Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29
 Modification Date: 15/06/2016 20:13:29
 Publication title: Second edition
 Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc,
 structure
 COD database code: 9008536

References

Structure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, **1**, 7 - 83, (1963)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – DPZ800

Name and formula

Reference code: 96-901-6232

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{12.00}\text{C}_{4.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 5,0870
 b (Å): 6,7790
 c (Å): 4,5260
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,64
 Volume of cell (10⁶ pm³): 156,08

RIR: 1,69

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:26:34
 Modification Date: 15/06/2016 20:26:34
 Structure TIDY: TRANS Origin 1/2 0 0
 Publication title: Thermal expansion and crystal structure of cementite, Fe₃C, between 4 and 600 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction Note: T = 600 K

COD database code: 9016231

References

Structure: Wood, I. G., Voadlo, L., Knight, K. S., Dobson, D. P., Marshall, W. G., Price, G. D., Brodholt, J., *Journal of Applied Crystallography*, **37**, 82 - 90, (2004)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	0	1	1	3,76415	23,617	3,8
2	0	2	0	3,38950	26,272	4,3
3	1	0	1	3,38138	26,336	0,1
4	1	1	1	3,02585	29,497	1,5
5	2	0	0	2,54350	35,258	4,8
6	1	2	1	2,39386	37,541	26,7
7	2	1	0	2,38139	37,745	17,4
8	0	0	2	2,26300	39,801	25,3
9	2	0	1	2,21735	40,656	15,4
10	2	1	1	2,10748	42,878	61,9
11	1	0	2	2,06764	43,746	59,1
12	2	2	0	2,03440	44,499	81,0
13	0	3	1	2,02170	44,793	100,0
14	1	1	2	1,97769	45,846	46,5
15	0	2	2	1,88208	48,320	3,0
16	1	3	1	1,87877	48,410	27,9
17	2	2	1	1,85557	49,055	44,6
18	1	2	2	1,76514	51,748	24,2
19	0	4	0	1,69475	54,068	9,3
20	2	0	2	1,69069	54,209	1,4
21	2	3	0	1,68930	54,257	7,7
22	2	1	2	1,64044	56,013	5,0
23	3	0	1	1,58788	58,039	12,1
24	2	3	1	1,58265	58,250	1,9
25	3	1	1	1,54604	59,767	4,6
26	1	3	2	1,52542	60,660	1,8
27	1	4	1	1,51510	61,117	1,3
28	2	2	2	1,51292	61,214	9,8
29	0	1	3	1,47264	63,077	0,0
30	1	0	3	1,44640	64,358	0,5
31	3	2	1	1,43792	64,783	0,4
32	1	1	3	1,41456	65,988	1,9
33	2	4	0	1,41035	66,210	2,4
34	3	0	2	1,35699	69,174	0,3
35	0	4	2	1,35652	69,201	0,7
36	2	3	2	1,35372	69,365	0,7
37	2	4	1	1,34649	69,791	0,4
38	3	1	2	1,33059	70,749	0,1
39	1	2	3	1,33034	70,764	15,4
40	1	4	2	1,31072	71,987	0,7
41	3	3	1	1,29919	72,727	0,0
42	0	5	1	1,29878	72,754	2,2
43	2	0	3	1,29758	72,832	0,1
44	2	1	3	1,27444	74,374	0,0
45	4	0	0	1,27175	74,559	0,6
46	3	2	2	1,25978	75,390	4,7
47	1	5	1	1,25841	75,486	2,2
48	0	3	3	1,25472	75,747	0,0
49	4	1	0	1,24994	76,088	0,0
50	4	0	1	1,22434	77,976	11,9
51	1	3	3	1,21821	78,443	12,9
52	2	2	3	1,21182	78,938	0,1
53	4	1	1	1,20484	79,485	1,1
54	2	4	2	1,19693	80,116	0,3
55	2	5	0	1,19644	80,156	4,6
56	4	2	0	1,19070	80,621	0,3
57	3	3	2	1,16334	82,928	13,3
58	3	4	1	1,15874	83,330	1,0

59	2	5	1	1,15670	83,510	12,4
60	4	2	1	1,15152	83,971	1,2
61	1	5	2	1,13379	85,594	6,9
62	0	0	4	1,13150	85,809	1,5
63	0	6	0	1,12983	85,966	3,6
64	3	0	3	1,12713	86,223	9,2
65	2	3	3	1,12525	86,402	0,0
66	3	1	3	1,11186	87,705	1,7
67	4	0	2	1,10867	88,022	0,3
68	4	3	0	1,10828	88,061	7,4
69	1	0	4	1,10451	88,440	4,6
70	1	4	3	1,10019	88,879	2,3
71	4	1	2	1,09414	89,502	0,0
72	1	1	4	1,09013	89,920	1,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – DPZ800

Name and formula

Reference code: 96-901-5705

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,4980

b (Å): 3,4980

c (Å): 3,4980

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,67Volume of cell (10⁶ pm³): 42,80

RIR: 8,52

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:25:36

Modification Date: 15/06/2016 20:25:36

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M620, P = 21.57 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9015704

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,01957	44,843	100,0
2	0	2	0	1,74900	52,262	44,9
3	0	2	2	1,23673	77,049	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha

Compound name: Iron-alpha

Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2,00}

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic

Space group: I m -3 m

Space group number: 229

a (Å): 2,8660

b (Å): 2,8660

c (Å): 2,8660

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88

Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29

Modification Date: 15/06/2016 20:13:29

Publication title: Second edition

Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc, structure

COD database code: 9008536

References

Structure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, **1**, 7 - 83, (1963)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-6232

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{12.00}\text{C}_{4.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 5,0870
 b (Å): 6,7790
 c (Å): 4,5260
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,64
 Volume of cell (10⁶ pm³): 156,08

RIR: 1,69

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:26:34
 Modification Date: 15/06/2016 20:26:34
 Structure TIDY: TRANS Origin 1/2 0 0
 Publication title: Thermal expansion and crystal structure of cementite, Fe₃C, between 4 and 600 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction Note: T = 600 K

COD database code: 9016231

References

Structure: Wood, I. G., Voadlo, L., Knight, K. S., Dobson, D. P., Marshall, W. G., Price, G. D., Brodholt, J., *Journal of Applied Crystallography*, **37**, 82 - 90, (2004)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	0	1	1	3,76415	23,617	3,8
2	0	2	0	3,38950	26,272	4,3
3	1	0	1	3,38138	26,336	0,1
4	1	1	1	3,02585	29,497	1,5
5	2	0	0	2,54350	35,258	4,8
6	1	2	1	2,39386	37,541	26,7
7	2	1	0	2,38139	37,745	17,4
8	0	0	2	2,26300	39,801	25,3
9	2	0	1	2,21735	40,656	15,4
10	2	1	1	2,10748	42,878	61,9
11	1	0	2	2,06764	43,746	59,1
12	2	2	0	2,03440	44,499	81,0
13	0	3	1	2,02170	44,793	100,0
14	1	1	2	1,97769	45,846	46,5
15	0	2	2	1,88208	48,320	3,0
16	1	3	1	1,87877	48,410	27,9
17	2	2	1	1,85557	49,055	44,6
18	1	2	2	1,76514	51,748	24,2
19	0	4	0	1,69475	54,068	9,3
20	2	0	2	1,69069	54,209	1,4
21	2	3	0	1,68930	54,257	7,7
22	2	1	2	1,64044	56,013	5,0
23	3	0	1	1,58788	58,039	12,1
24	2	3	1	1,58265	58,250	1,9
25	3	1	1	1,54604	59,767	4,6
26	1	3	2	1,52542	60,660	1,8
27	1	4	1	1,51510	61,117	1,3
28	2	2	2	1,51292	61,214	9,8
29	0	1	3	1,47264	63,077	0,0
30	1	0	3	1,44640	64,358	0,5
31	3	2	1	1,43792	64,783	0,4
32	1	1	3	1,41456	65,988	1,9
33	2	4	0	1,41035	66,210	2,4
34	3	0	2	1,35699	69,174	0,3
35	0	4	2	1,35652	69,201	0,7
36	2	3	2	1,35372	69,365	0,7
37	2	4	1	1,34649	69,791	0,4
38	3	1	2	1,33059	70,749	0,1
39	1	2	3	1,33034	70,764	15,4
40	1	4	2	1,31072	71,987	0,7
41	3	3	1	1,29919	72,727	0,0
42	0	5	1	1,29878	72,754	2,2
43	2	0	3	1,29758	72,832	0,1
44	2	1	3	1,27444	74,374	0,0
45	4	0	0	1,27175	74,559	0,6
46	3	2	2	1,25978	75,390	4,7
47	1	5	1	1,25841	75,486	2,2
48	0	3	3	1,25472	75,747	0,0
49	4	1	0	1,24994	76,088	0,0
50	4	0	1	1,22434	77,976	11,9
51	1	3	3	1,21821	78,443	12,9
52	2	2	3	1,21182	78,938	0,1
53	4	1	1	1,20484	79,485	1,1
54	2	4	2	1,19693	80,116	0,3
55	2	5	0	1,19644	80,156	4,6
56	4	2	0	1,19070	80,621	0,3
57	3	3	2	1,16334	82,928	13,3
58	3	4	1	1,15874	83,330	1,0

59	2	5	1	1,15670	83,510	12,4
60	4	2	1	1,15152	83,971	1,2
61	1	5	2	1,13379	85,594	6,9
62	0	0	4	1,13150	85,809	1,5
63	0	6	0	1,12983	85,966	3,6
64	3	0	3	1,12713	86,223	9,2
65	2	3	3	1,12525	86,402	0,0
66	3	1	3	1,11186	87,705	1,7
67	4	0	2	1,10867	88,022	0,3
68	4	3	0	1,10828	88,061	7,4
69	1	0	4	1,10451	88,440	4,6
70	1	4	3	1,10019	88,879	2,3
71	4	1	2	1,09414	89,502	0,0
72	1	1	4	1,09013	89,920	1,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-5705

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,4980

b (Å): 3,4980

c (Å): 3,4980

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,67Volume of cell (10⁶ pm³): 42,80

RIR: 8,52

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:25:36

Modification Date: 15/06/2016 20:25:36

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M620, P = 21.57 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9015704

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,01957	44,843	100,0
2	0	2	0	1,74900	52,262	44,9
3	0	2	2	1,23673	77,049	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha

Compound name: Iron-alpha

Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2.00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: I m -3 m

Space group number: 229

a (Å): 2,8660

b (Å): 2,8660

c (Å): 2,8660

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29

Modification Date: 15/06/2016 20:13:29

Publication title: Second edition

Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc, structure

COD database code: 9008536

ReferencesStructure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, 1, 7 - 83, (1963)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-5705

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,4980

b (Å): 3,4980

c (Å): 3,4980

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,67Volume of cell (10⁶ pm³): 42,80

RIR: 8,52

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:25:36

Modification Date: 15/06/2016 20:25:36

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M620, P = 21.57 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9015704

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,01957	44,843	100,0
2	0	2	0	1,74900	52,262	44,9
3	0	2	2	1,23673	77,049	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (450-15)

Name and formula

Reference code: 96-101-0932

Mineral name: Cohenite

Compound name: Cohenite

Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{16.00}\text{C}_{8.00}$ **Crystallographic parameters**

Crystal system: Orthorhombic

Space group: P n m a

Space group number: 62

a (Å): 4,5110

b (Å): 5,0470

c (Å): 6,7380

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 10,71Volume of cell (10⁶ pm³): 153,40

RIR: 6,60

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 14/06/2016 12:21:40

Modification Date: 14/06/2016 12:21:40

Publication title: A Study on the Structure of Cementite

COD database code: 1010931

ReferencesStructure: Shimura, Shigetaka, *Proceedings of the Imperial Academy (Tokyo)*, **6**, 269 - 271, (1930)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	4,03947	21,986	17,5
2	1	0	1	3,74849	23,717	0,0
3	0	0	2	3,36900	26,434	10,6

4	1	1	1	3,00928	29,663	100,0
5	1	0	2	2,69929	33,162	2,5
6	0	2	0	2,52350	35,546	0,0
7	1	1	2	2,38024	37,764	4,5
8	2	0	0	2,25550	39,939	0,4
9	2	0	1	2,13885	42,218	6,7
10	1	2	1	2,09334	43,182	7,0
11	2	1	0	2,05922	43,934	12,1
12	0	1	3	2,05198	44,097	0,3
13	0	2	2	2,01973	44,839	22,2
14	1	0	3	2,01057	45,055	24,6
15	2	1	1	1,96931	46,052	2,5
16	2	0	2	1,87425	48,534	27,2
17	1	1	3	1,86782	48,712	30,9
18	1	2	2	1,84340	49,400	0,6
19	2	1	2	1,75701	52,006	3,0
20	0	0	4	1,68450	54,424	4,9
21	2	2	0	1,68168	54,523	10,9
22	0	3	1	1,63223	56,320	5,8
23	2	2	1	1,63163	56,342	2,2
24	2	0	3	1,59151	57,895	0,3
25	1	0	4	1,57806	58,435	0,8
26	1	2	3	1,57249	58,663	2,0
27	1	3	1	1,53484	60,248	3,4
28	2	1	3	1,51783	60,995	0,1
29	1	1	4	1,50616	61,519	1,6
30	2	2	2	1,50464	61,588	0,9
31	3	0	1	1,46757	63,321	6,0
32	1	3	2	1,42774	65,303	3,9
33	3	1	1	1,40920	66,271	5,2
34	0	2	4	1,40103	66,708	2,5
35	3	0	2	1,37311	68,249	1,5
36	2	0	4	1,34964	69,604	3,5
37	2	3	0	1,34853	69,670	0,6
38	0	3	3	1,34649	69,791	0,3
39	2	2	3	1,34615	69,811	0,1
40	1	2	4	1,33799	70,300	0,3
41	3	1	2	1,32495	71,096	0,2
42	2	3	1	1,32231	71,259	3,0
43	2	1	4	1,30383	72,427	1,8
44	0	1	5	1,30199	72,546	0,1
45	1	0	5	1,29121	73,249	0,7
46	1	3	3	1,29024	73,314	0,1
47	3	2	1	1,26863	74,773	0,9
48	0	4	0	1,26175	75,252	0,0
49	2	3	2	1,25196	75,944	1,9
50	1	1	5	1,25093	76,018	3,8
51	3	0	3	1,24950	76,120	0,4
52	3	1	3	1,21288	78,855	0,4
53	3	2	2	1,20612	79,384	0,8
54	1	4	1	1,19582	80,205	0,0
55	2	2	4	1,19012	80,668	1,5
56	0	4	2	1,18160	81,372	0,2
57	2	0	5	1,15685	83,497	0,2
58	2	3	3	1,15614	83,559	0,2
59	1	3	4	1,15096	84,021	3,0
60	1	2	5	1,14948	84,154	2,1
61	1	4	2	1,14304	84,738	0,0
62	4	0	0	1,12775	86,164	0,3
63	2	1	5	1,12760	86,178	0,1
64	0	0	6	1,12300	86,618	3,2

65	3	0	4	1,12176	86,737	1,3
66	3	2	3	1,11975	86,931	2,5
67	4	0	1	1,11228	87,663	1,4
68	3	3	1	1,10591	88,298	0,0
69	2	4	0	1,10116	88,779	0,1
70	4	1	0	1,10061	88,836	0,5
71	3	1	4	1,09504	89,408	0,1
72	1	0	6	1,08974	89,961	0,1

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha

Compound name: Iron-alpha

Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2.00}

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic

Space group: I m -3 m

Space group number: 229

a (Å): 2,8660

b (Å): 2,8660

c (Å): 2,8660

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88

Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29

Modification Date: 15/06/2016 20:13:29

Publication title: Second edition

Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc, structure

COD database code: 9008536

References

Structure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, 1, 7 - 83, (1963)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-6183

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{12.00}\text{C}_{4.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 5,0790
 b (Å): 6,7300
 c (Å): 4,5140
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,73
 Volume of cell (10⁶ pm³): 154,30

RIR: 5,83

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:26:28
 Modification Date: 15/06/2016 20:26:28
 Structure TIDY: TRANS b,c,a origin 1/2 0 0
 Structure TIDY: REMARK Transformed from setting P b n m.
 Publication title: The crystal structure of cementite, Fe₃C
 COD database code: 9016182

References

Structure: Lipson, H., Petch, N. J., *The Journal of the Iron and Steel Institute*, **142**, 95 - 103, (1940)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	3,74883	23,715	100,0
2	1	0	1	3,37403	26,394	0,1
3	0	2	0	3,36500	26,466	0,4
4	1	1	1	3,01620	29,593	6,5
5	2	0	0	2,53950	35,315	1,6
6	1	2	1	2,38260	37,726	9,1
7	2	1	0	2,37597	37,835	16,8
8	0	0	2	2,25700	39,911	8,3
9	2	0	1	2,21329	40,734	26,0
10	2	1	1	2,10251	42,984	1,3
11	1	0	2	2,06252	43,860	13,5
12	2	2	0	2,02704	44,669	19,7
13	0	3	1	2,00893	45,094	3,3
14	1	1	2	1,97199	45,986	3,1
15	0	2	2	1,87442	48,530	0,6
16	1	3	1	1,86810	48,704	7,1
17	2	2	1	1,84915	49,236	1,8
18	1	2	2	1,75849	51,959	12,0
19	2	0	2	1,68701	54,337	0,1
20	0	4	0	1,68250	54,494	1,7
21	2	3	0	1,68128	54,537	1,9
22	2	1	2	1,63638	56,164	0,9
23	3	0	1	1,58518	58,148	5,4
24	2	3	1	1,57555	58,538	17,2
25	3	1	1	1,54295	59,899	0,7
26	1	3	2	1,51833	60,973	9,4
27	2	2	2	1,50810	61,431	3,7
28	1	4	1	1,50568	61,540	0,7
29	0	1	3	1,46841	63,280	0,0
30	1	0	3	1,44269	64,543	0,1
31	3	2	1	1,43403	64,981	0,1
32	1	1	3	1,41064	66,195	0,5
33	2	4	0	1,40260	66,624	1,4
34	3	0	2	1,35433	69,329	1,6
35	0	4	2	1,34893	69,646	0,1
36	2	3	2	1,34831	69,683	1,0
37	2	4	1	1,33943	70,213	0,3
38	3	1	2	1,32771	70,925	4,5
39	1	2	3	1,32596	71,033	6,6
40	1	4	2	1,30374	72,433	0,2
41	3	3	1	1,29459	73,027	0,0
42	2	0	3	1,29450	73,033	0,0
43	0	5	1	1,28988	73,338	6,8
44	2	1	3	1,27120	74,596	0,0
45	4	0	0	1,26975	74,696	0,0
46	3	2	2	1,25639	75,629	0,1
47	1	5	1	1,25019	76,070	1,3
48	0	3	3	1,24961	76,112	0,0
49	4	1	0	1,24774	76,247	0,0
50	4	0	1	1,22231	78,130	0,9
51	1	3	3	1,21342	78,813	7,6
52	2	2	3	1,20818	79,221	0,0
53	4	1	1	1,20264	79,659	0,2
54	2	4	2	1,19130	80,572	0,4
55	2	5	0	1,18928	80,738	3,2
56	4	2	0	1,18799	80,843	0,3
57	3	3	2	1,15942	83,270	1,1
58	3	4	1	1,15376	83,771	0,3

59	2	5	1	1,15003	84,104	0,1
60	4	2	1	1,14887	84,209	5,3
61	0	0	4	1,12850	86,092	0,6
62	1	5	2	1,12720	86,215	0,0
63	3	0	3	1,12468	86,457	4,3
64	0	6	0	1,12167	86,746	2,4
65	2	3	3	1,12122	86,789	0,0
66	3	1	3	1,10929	87,960	1,3
67	4	0	2	1,10664	88,225	0,1
68	4	3	0	1,10502	88,388	4,5
69	1	0	4	1,10163	88,731	1,1
70	1	4	3	1,09520	89,392	1,5
71	4	1	2	1,09198	89,726	0,0

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-5705

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,4980

b (Å): 3,4980

c (Å): 3,4980

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,67Volume of cell (10⁶ pm³): 42,80

RIR: 8,52

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:25:36

Modification Date: 15/06/2016 20:25:36

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M620, P = 21.57 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9015704

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,01957	44,843	100,0
2	0	2	0	1,74900	52,262	44,9
3	0	2	2	1,23673	77,049	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-101-0932

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{16.00}\text{C}_{8.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 4,5110
 b (Å): 5,0470
 c (Å): 6,7380
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 10,71
 Volume of cell (10⁶ pm³): 153,40

RIR: 6,60

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 14/06/2016 12:21:40
 Modification Date: 14/06/2016 12:21:40
 Publication title: A Study on the Structure of Cementite
 COD database code: 1010931

References

Structure: Shimura, Shigetaka, *Proceedings of the Imperial Academy (Tokyo)*, **6**, 269 - 271, (1930)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	4,03947	21,986	17,5
2	1	0	1	3,74849	23,717	0,0
3	0	0	2	3,36900	26,434	10,6
4	1	1	1	3,00928	29,663	100,0
5	1	0	2	2,69929	33,162	2,5
6	0	2	0	2,52350	35,546	0,0
7	1	1	2	2,38024	37,764	4,5
8	2	0	0	2,25550	39,939	0,4
9	2	0	1	2,13885	42,218	6,7
10	1	2	1	2,09334	43,182	7,0
11	2	1	0	2,05922	43,934	12,1
12	0	1	3	2,05198	44,097	0,3
13	0	2	2	2,01973	44,839	22,2
14	1	0	3	2,01057	45,055	24,6
15	2	1	1	1,96931	46,052	2,5
16	2	0	2	1,87425	48,534	27,2
17	1	1	3	1,86782	48,712	30,9
18	1	2	2	1,84340	49,400	0,6
19	2	1	2	1,75701	52,006	3,0
20	0	0	4	1,68450	54,424	4,9
21	2	2	0	1,68168	54,523	10,9
22	0	3	1	1,63223	56,320	5,8
23	2	2	1	1,63163	56,342	2,2
24	2	0	3	1,59151	57,895	0,3
25	1	0	4	1,57806	58,435	0,8
26	1	2	3	1,57249	58,663	2,0
27	1	3	1	1,53484	60,248	3,4
28	2	1	3	1,51783	60,995	0,1
29	1	1	4	1,50616	61,519	1,6
30	2	2	2	1,50464	61,588	0,9
31	3	0	1	1,46757	63,321	6,0
32	1	3	2	1,42774	65,303	3,9
33	3	1	1	1,40920	66,271	5,2
34	0	2	4	1,40103	66,708	2,5
35	3	0	2	1,37311	68,249	1,5
36	2	0	4	1,34964	69,604	3,5
37	2	3	0	1,34853	69,670	0,6
38	0	3	3	1,34649	69,791	0,3
39	2	2	3	1,34615	69,811	0,1
40	1	2	4	1,33799	70,300	0,3
41	3	1	2	1,32495	71,096	0,2
42	2	3	1	1,32231	71,259	3,0
43	2	1	4	1,30383	72,427	1,8
44	0	1	5	1,30199	72,546	0,1
45	1	0	5	1,29121	73,249	0,7
46	1	3	3	1,29024	73,314	0,1
47	3	2	1	1,26863	74,773	0,9
48	0	4	0	1,26175	75,252	0,0
49	2	3	2	1,25196	75,944	1,9
50	1	1	5	1,25093	76,018	3,8
51	3	0	3	1,24950	76,120	0,4
52	3	1	3	1,21288	78,855	0,4
53	3	2	2	1,20612	79,384	0,8
54	1	4	1	1,19582	80,205	0,0
55	2	2	4	1,19012	80,668	1,5
56	0	4	2	1,18160	81,372	0,2
57	2	0	5	1,15685	83,497	0,2
58	2	3	3	1,15614	83,559	0,2

59	1	3	4	1,15096	84,021	3,0
60	1	2	5	1,14948	84,154	2,1
61	1	4	2	1,14304	84,738	0,0
62	4	0	0	1,12775	86,164	0,3
63	2	1	5	1,12760	86,178	0,1
64	0	0	6	1,12300	86,618	3,2
65	3	0	4	1,12176	86,737	1,3
66	3	2	3	1,11975	86,931	2,5
67	4	0	1	1,11228	87,663	1,4
68	3	3	1	1,10591	88,298	0,0
69	2	4	0	1,10116	88,779	0,1
70	4	1	0	1,10061	88,836	0,5
71	3	1	4	1,09504	89,408	0,1
72	1	0	6	1,08974	89,961	0,1

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha

Compound name: Iron-alpha

Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2.00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: I m -3 m

Space group number: 229

a (Å): 2,8660

b (Å): 2,8660

c (Å): 2,8660

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29

Modification Date: 15/06/2016 20:13:29

Publication title: Second edition

Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc, structure

COD database code: 9008536

ReferencesStructure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, 1, 7 - 83, (1963)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-15)

Name and formula

Reference code: 96-901-6335

Mineral name: Iron
 Compound name: Iron
 Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
 Space group: F m -3 m
 Space group number: 225

a (Å): 3,5210
 b (Å): 3,5210
 c (Å): 3,5210
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,50
 Volume of cell (10⁶ pm³): 43,65

RIR: 8,54

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Metallic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:26:47
 Modification Date: 15/06/2016 20:26:47
 Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M605, P = 17.59 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9016334

References

Structure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,03285	44,534	100,0
2	0	2	0	1,76050	51,895	45,0
3	0	2	2	1,24486	76,455	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-900-8537

Mineral name: Iron-alpha
 Compound name: Iron-alpha
 Common name: Iron-alpha

Chemical formula: Fe_{2.00}

Crystallographic parameters

Crystal system: Cubic
 Space group: I m -3 m
 Space group number: 229

a (Å): 2,8660
 b (Å): 2,8660
 c (Å): 2,8660
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,88
 Volume of cell (10⁶ pm³): 23,54

RIR: 11,76

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Metallic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:13:29
 Modification Date: 15/06/2016 20:13:29
 Publication title: Second edition
 Interscience Publishers, New York, New York Sample at T = 298 K Body centered cubic, bcc,
 structure
 COD database code: 9008536

References

Structure: Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, 1, 7 - 83, (1963)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,02657	44,680	100,0
2	0	2	0	1,43300	65,033	13,6
3	1	2	1	1,17004	82,349	24,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-901-5705

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,4980

b (Å): 3,4980

c (Å): 3,4980

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,67Volume of cell (10⁶ pm³): 42,80

RIR: 8,52

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:25:36

Modification Date: 15/06/2016 20:25:36

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M620, P = 21.57 GPa, T = 1273 K

COD database code: 9015704

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,01957	44,843	100,0
2	0	2	0	1,74900	52,262	44,9
3	0	2	2	1,23673	77,049	22,9

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – L (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-901-6183

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{12.00}\text{C}_{4.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 5,0790
 b (Å): 6,7300
 c (Å): 4,5140
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,73
 Volume of cell (10⁶ pm³): 154,30

RIR: 5,83

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:26:28
 Modification Date: 15/06/2016 20:26:28
 Structure TIDY: TRANS b,c,a origin 1/2 0 0
 Structure TIDY: REMARK Transformed from setting P b n m.
 Publication title: The crystal structure of cementite, Fe₃C
 COD database code: 9016182

References

Structure: Lipson, H., Petch, N. J., *The Journal of the Iron and Steel Institute*, **142**, 95 - 103, (1940)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	3,74883	23,715	100,0
2	1	0	1	3,37403	26,394	0,1
3	0	2	0	3,36500	26,466	0,4
4	1	1	1	3,01620	29,593	6,5
5	2	0	0	2,53950	35,315	1,6
6	1	2	1	2,38260	37,726	9,1
7	2	1	0	2,37597	37,835	16,8
8	0	0	2	2,25700	39,911	8,3
9	2	0	1	2,21329	40,734	26,0
10	2	1	1	2,10251	42,984	1,3
11	1	0	2	2,06252	43,860	13,5
12	2	2	0	2,02704	44,669	19,7
13	0	3	1	2,00893	45,094	3,3
14	1	1	2	1,97199	45,986	3,1
15	0	2	2	1,87442	48,530	0,6
16	1	3	1	1,86810	48,704	7,1
17	2	2	1	1,84915	49,236	1,8
18	1	2	2	1,75849	51,959	12,0
19	2	0	2	1,68701	54,337	0,1
20	0	4	0	1,68250	54,494	1,7
21	2	3	0	1,68128	54,537	1,9
22	2	1	2	1,63638	56,164	0,9
23	3	0	1	1,58518	58,148	5,4
24	2	3	1	1,57555	58,538	17,2
25	3	1	1	1,54295	59,899	0,7
26	1	3	2	1,51833	60,973	9,4
27	2	2	2	1,50810	61,431	3,7
28	1	4	1	1,50568	61,540	0,7
29	0	1	3	1,46841	63,280	0,0
30	1	0	3	1,44269	64,543	0,1
31	3	2	1	1,43403	64,981	0,1
32	1	1	3	1,41064	66,195	0,5
33	2	4	0	1,40260	66,624	1,4
34	3	0	2	1,35433	69,329	1,6
35	0	4	2	1,34893	69,646	0,1
36	2	3	2	1,34831	69,683	1,0
37	2	4	1	1,33943	70,213	0,3
38	3	1	2	1,32771	70,925	4,5
39	1	2	3	1,32596	71,033	6,6
40	1	4	2	1,30374	72,433	0,2
41	3	3	1	1,29459	73,027	0,0
42	2	0	3	1,29450	73,033	0,0
43	0	5	1	1,28988	73,338	6,8
44	2	1	3	1,27120	74,596	0,0
45	4	0	0	1,26975	74,696	0,0
46	3	2	2	1,25639	75,629	0,1
47	1	5	1	1,25019	76,070	1,3
48	0	3	3	1,24961	76,112	0,0
49	4	1	0	1,24774	76,247	0,0
50	4	0	1	1,22231	78,130	0,9
51	1	3	3	1,21342	78,813	7,6
52	2	2	3	1,20818	79,221	0,0
53	4	1	1	1,20264	79,659	0,2
54	2	4	2	1,19130	80,572	0,4
55	2	5	0	1,18928	80,738	3,2
56	4	2	0	1,18799	80,843	0,3
57	3	3	2	1,15942	83,270	1,1
58	3	4	1	1,15376	83,771	0,3

59	2	5	1	1,15003	84,104	0,1
60	4	2	1	1,14887	84,209	5,3
61	0	0	4	1,12850	86,092	0,6
62	1	5	2	1,12720	86,215	0,0
63	3	0	3	1,12468	86,457	4,3
64	0	6	0	1,12167	86,746	2,4
65	2	3	3	1,12122	86,789	0,0
66	3	1	3	1,10929	87,960	1,3
67	4	0	2	1,10664	88,225	0,1
68	4	3	0	1,10502	88,388	4,5
69	1	0	4	1,10163	88,731	1,1
70	1	4	3	1,09520	89,392	1,5
71	4	1	2	1,09198	89,726	0,0

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-901-4462

Mineral name: Cohenite
 Compound name: Cohenite
 Common name: Cohenite

Chemical formula: $\text{Fe}_{12.00}\text{C}_{4.00}$

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
 Space group: P n m a
 Space group number: 62

a (Å): 5,0820
 b (Å): 6,7340
 c (Å): 6,5120
 Alpha (°): 90,0000
 Beta (°): 90,0000
 Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 5,35
 Volume of cell (10⁶ pm³): 222,85

RIR: 1,82

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic
 User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:23:17
 Modification Date: 15/06/2016 20:23:17
 Structure TIDY: TRANS Origin 1/2 0 0
 Publication title: Thermal expansion and crystal structure of cementite, Fe₃C, between 4 and 600 K determined by time-of-flight neutron powder diffraction Note: T = 40 K

COD database code: 9014461

References

Structure: Wood, I. G., Vocadlo, L., Knight, K. S., Dobson, D. P., Marshall, W. G., Price, G. D., Brodholt, J., *Journal of Applied Crystallography*, **37**, 82 - 90, (2004)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta[deg]	I [%]
1	0	1	1	4,68120	18,942	4,3
2	1	0	1	4,00638	22,170	0,1
3	1	1	1	3,44309	25,856	1,1
4	0	2	0	3,36700	26,450	3,2
5	0	0	2	3,25600	27,369	46,8
6	1	0	2	2,74157	32,636	100,0
7	1	2	1	2,57761	34,776	28,2
8	2	0	0	2,54100	35,294	2,1
9	1	1	2	2,53920	35,319	80,3
10	2	1	0	2,37738	37,811	12,7
11	2	0	1	2,36717	37,981	17,5
12	0	2	2	2,34060	38,429	4,9
13	2	1	1	2,23321	40,355	48,9
14	1	2	2	2,12595	42,487	34,1
15	0	3	1	2,12213	42,567	80,7
16	0	1	3	2,06598	43,783	0,0
17	2	2	0	2,02824	44,641	49,7
18	2	0	2	2,00319	45,230	1,3
19	1	0	3	1,99620	45,397	0,6
20	1	3	1	1,95826	46,327	22,2
21	2	2	1	1,93648	46,879	39,6
22	2	1	2	1,92004	47,305	6,2
23	1	1	3	1,91388	47,467	4,9
24	1	3	2	1,73679	52,657	1,7
25	2	2	2	1,72155	53,160	10,5
26	1	2	3	1,71710	53,308	36,5
27	0	4	0	1,68350	54,459	6,3
28	2	3	0	1,68228	54,502	6,5
29	2	0	3	1,65044	55,644	0,2
30	3	0	1	1,63944	56,050	11,5
31	2	3	1	1,62881	56,448	0,8
32	0	0	4	1,62800	56,479	6,8
33	2	1	3	1,60300	57,441	0,1
34	3	1	1	1,59291	57,839	2,8
35	0	3	3	1,56040	59,162	0,0
36	1	4	1	1,55204	59,513	1,3
37	1	0	4	1,55039	59,583	14,8
38	1	1	4	1,51086	61,306	6,4
39	3	0	2	1,50278	61,672	0,0
40	0	4	2	1,49543	62,008	0,8
41	2	3	2	1,49458	62,048	1,2
42	1	3	3	1,49167	62,182	23,3
43	2	2	3	1,48198	62,635	0,1
44	3	2	1	1,47399	63,013	0,4
45	3	1	2	1,46670	63,362	0,1
46	0	2	4	1,46566	63,412	0,0
47	1	4	2	1,43461	64,951	0,9
48	1	2	4	1,40827	66,321	5,7
49	2	4	0	1,40343	66,579	1,6
50	3	2	2	1,37230	68,294	4,0
51	2	4	1	1,37193	68,315	0,2
52	2	0	4	1,37079	68,380	0,0
53	2	1	4	1,34324	69,984	1,4
54	3	0	3	1,33546	70,452	16,4
55	2	3	3	1,32970	70,803	0,1
56	3	3	1	1,32392	71,159	0,1
57	0	5	1	1,31889	71,472	1,7
58	3	1	3	1,30995	72,036	2,3

59	2	4	2	1,28880	73,409	0,3
60	1	4	3	1,28694	73,533	3,2
61	0	1	5	1,27870	74,085	0,4
62	1	5	1	1,27660	74,228	1,9
63	1	3	4	1,27568	74,290	0,0
64	4	0	0	1,27050	74,644	0,1
65	2	2	4	1,26960	74,706	4,3
66	1	0	5	1,26163	75,260	0,0
67	3	3	2	1,24876	76,173	15,5
68	4	1	0	1,24847	76,194	0,0
69	4	0	1	1,24699	76,301	9,4
70	3	2	3	1,24138	76,708	1,4
71	1	1	5	1,24005	76,805	0,2
72	4	1	1	1,22614	77,839	1,3
73	1	5	2	1,20882	79,172	7,7
74	2	5	0	1,18998	80,680	4,2
75	4	2	0	1,18869	80,786	0,7
76	4	0	2	1,18359	81,207	0,1
77	1	2	5	1,18141	81,387	1,0
78	2	4	3	1,17855	81,627	0,1
79	3	4	1	1,17453	81,967	1,0
80	3	0	4	1,17381	82,027	0,0
81	2	5	1	1,17060	82,301	9,2
82	0	4	4	1,17030	82,327	0,7
83	2	3	4	1,16989	82,362	0,3
84	4	2	1	1,16937	82,407	1,1
85	4	1	2	1,16572	82,721	0,0
86	2	0	5	1,15902	83,305	1,2
87	3	1	4	1,15637	83,539	0,0
88	3	3	3	1,14770	84,315	0,0
89	0	5	3	1,14442	84,613	0,0
90	2	1	5	1,14223	84,813	3,9
91	1	4	4	1,14045	84,976	0,5
92	0	3	5	1,12651	86,282	7,1
93	0	6	0	1,12233	86,682	2,5
94	3	4	2	1,12109	86,801	0,3
95	2	5	2	1,11768	87,133	2,0
96	4	2	2	1,11661	87,238	0,4
97	1	5	3	1,11646	87,252	5,5
98	3	2	4	1,10839	88,050	1,8
99	4	3	0	1,10568	88,322	6,0
100	1	3	5	1,09981	88,917	1,6
101	4	0	3	1,09649	89,258	0,0
102	2	2	5	1,09591	89,318	3,0
103	4	3	1	1,09007	89,926	0,4

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-901-4606

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{4,00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: F m -3 m

Space group number: 225

a (Å): 3,5550

b (Å): 3,5550

c (Å): 3,5550

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 8,26Volume of cell (10⁶ pm³): 44,93

RIR: 8,58

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:23:32

Modification Date: 15/06/2016 20:23:32

Publication title: Isothermal compression of face-centered cubic iron Note: gamma iron, Sample M622, P = 9.90 GPa, T = 1073 K

COD database code: 9014605

ReferencesStructure: Nishihara, Y., Nakajima, Y., Akashi, A., Tsujino, N., Takahashi, E., Funakoshi, K., Higo, Y., *American Mineralogist*, **97**, 1417 - 1420, (2012)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	1	1	1	2,05248	44,086	100,0
2	0	2	0	1,77750	51,362	45,1
3	0	2	2	1,25688	75,594	23,1

DIFRATOGRAMAS PADRÃO DE ACORDO COM O COD – C (600-30)

Name and formula

Reference code: 96-901-3477

Mineral name: Iron

Compound name: Iron

Common name: Iron

Chemical formula: Fe_{2.00}**Crystallographic parameters**

Crystal system: Cubic

Space group: I m -3 m

Space group number: 229

a (Å): 2,8860

b (Å): 2,8860

c (Å): 2,8860

Alpha (°): 90,0000

Beta (°): 90,0000

Gamma (°): 90,0000

Calculated density (g/cm³): 7,71Volume of cell (10⁶ pm³): 24,04

RIR: 11,79

Subfiles and quality

Subfiles: User Inorganic

User Metallic

User Mineral

Quality: User From Structure (=)

Comments

Creation Date: 15/06/2016 20:21:32

Modification Date: 15/06/2016 20:21:32

Publication title: The lattice expansion of iron Locality: synthetic Sample: at T = 921 K

COD database code: 9013476

ReferencesStructure: Basinski, Z. S., Hume-Rothery W, Sutton, A. L., *Proceedings of the Royal Society of London A*, **229**, 459 - 467, (1955)**Peak list**

No.	h	k	l	d [Å]	2Theta [deg]	I [%]
1	0	1	1	2,04071	44,354	100,0
2	0	2	0	1,44300	64,528	13,7
3	1	2	1	1,17820	81,656	24,4