

# Aspectos cristalográficos de la formación de ferrita Widmannstätten en aceros de bajo y medio contenido de carbono

## Crystallographic aspects of Widmannstätten ferrite formation in low and medium carbon steels

Felipe Castro Cerda<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Universidad de Santiago de Chile.

<sup>2</sup> Delft University of Technology, Department of Materials Science and Engineering, Netherlands.

[felipe.castro@usach.cl](mailto:felipe.castro@usach.cl)

### Resumen

Se analizaron metalografías de la microestructura Widmannstätten en aceros de bajo y medio carbono de acuerdo a la posible relación de orientación entre las fases FCC y BCC. Se propone analizar 2 relaciones de orientación: Bain  $\{001\}_{\gamma} // \{001\}_{\alpha}$ ,  $\langle 110 \rangle_{\gamma} // \langle 001 \rangle_{\alpha}$  y Kurdjumov – Sachs  $\{111\}_{\gamma} // \{110\}_{\alpha}$ ,  $\langle 110 \rangle_{\gamma} // \langle 111 \rangle_{\alpha}$ . Se midió la difracción de electrones retrodispersados para evaluar las orientaciones de las placas, y luego se aplicó una metodología de reconstrucción del grano austenítico basada en las relaciones de orientación propuestas. Se comprobó que la relación que permite obtener las orientaciones medidas en placas de ferrita Widmannstätten es la Kurdjumov – Sachs, dentro de una tolerancia angular de 5°. Se propone una posible justificación de las observaciones metalográficas basada en dicha relación de orientación.

**Palabras Clave:** Metalurgia física; Acero; Ferrita; Widmannstätten; Relación de orientación.

### Abstract

Metallography of the Widmannstätten microstructure in low and medium carbon steels were analyzed according to the possible orientation relationship between the FCC and BCC phases. It is proposed to analyze 2 orientation relationships: Bain  $\{001\}_{\gamma} // \{001\}_{\alpha}$ ,  $\langle 110 \rangle_{\gamma} // \langle 001 \rangle_{\alpha}$  and Kurdjumov – Sachs  $\{111\}_{\gamma} // \{110\}_{\alpha}$ ,  $\langle 110 \rangle_{\gamma} // \langle 111 \rangle_{\alpha}$ . Backscattered electron diffraction was measured to assess plate orientations, and then an austenitic grain reconstruction methodology based on the proposed orientation relationships was applied. It was verified that the relation that allows to obtain the orientations measured in Widmannstätten ferrite plates is the Kurdjumov – Sachs, within an angular tolerance of 5°. A possible justification of the metallographic observations based on said orientation relationship is proposed.

**Keywords:** Physical metallurgy; Steel; Ferrite; Widmannstätten; Orientation relationship.

## Introducción

La microestructura tipo Widmannstätten en aceros es el resultado del crecimiento de placas de ferrita (o cementita) en austenita. A pesar de que esta microestructura ha sido extensamente descrita en la literatura, todavía no se tiene completa claridad respecto al mecanismo específico que da origen a este tipo de crecimiento. Tal vez la hipótesis de crecimiento más simplificada es la analogía al crecimiento dendrítico, donde la ventaja cinética que produce la formación de una protuberancia en una intercara plana  $\alpha/\gamma$  explicaría la desestabilización del crecimiento planar de la ferrita, dando paso a una estructura Widmannstätten. Ignorando aspectos cristalográficos, ésta hipótesis podría jugar un rol en el crecimiento de una morfología de agujas secundarias. Sin embargo, no podría extenderse para entender la formación de agujas primarias ni para explicar una microestructura en forma de placas. Es claro que la cristalografía juega un rol fundamental en el crecimiento de la microestructura Widmannstätten, como se ha demostrado en estudios anteriores.

La observación metalográfica de la morfología tipo Widmannstätten revela un ordenamiento de las placas respecto al grano de austenita en el cual crecieron. Este ordenamiento consiste en la relación de orientación de Kurdjumov - Sachs (KS), que puede definirse en índices de Miller como  $\{111\}_\gamma // \{110\}_\alpha$ ,

$\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 111 \rangle_\alpha$ <sup>1</sup>. La relación KS entre las fases BCC y FCC no solamente se presenta en la morfología tipo Widmannstätten, sino también en la ferrita tipo alotriomorfa, bainita y martensita. Mas generalmente, es la relación de orientación predominante en transformaciones controladas por difusión y controladas por el movimiento de la intercara. Volviendo a la observación metalográfica de la morfología Widmannstätten, es posible observar que la distribución de las placas no necesariamente sugiere una relación tipo KS. Por ejemplo considerar la Figura N° 1, que muestra la microestructura de un acero comercial con 0.44%C en peso enfriado lentamente desde el rango austenítico. El grano austenítico previo es claramente delineado por la precipitación de ferrita de borde de grano, mientras que las placas de Widmannstätten crecen desde el borde de grano hacia el interior, formando entre ellas ángulos cercanos a los 90°. Considerar ahora el caso de una estructura martensítica (Figura N° 2), donde la orientación entre las fases BCC y FCC es tipo KS, pero la subestructura rara vez se observa formando ángulos de 90°. ¿Es posible que estas placas de ferrita Widmannstätten tengan una orientación cristalográfica diferente a la KS? Durante el desarrollo del presente estudio vamos a explorar las posibilidades desde la perspectiva científica, aplicando herramientas de evaluación cuantitativa como la difracción de electrones retrodispersados.

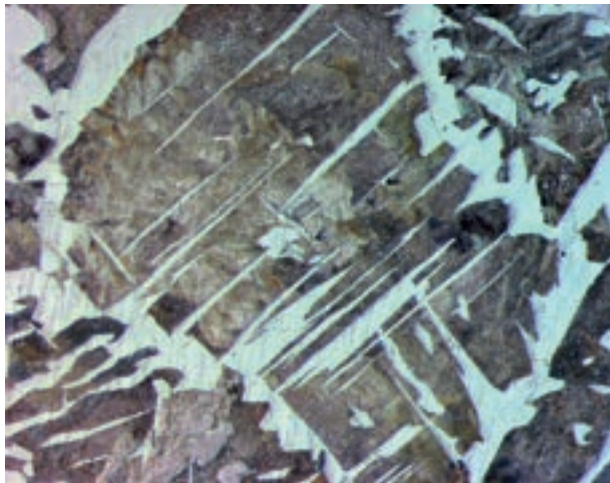


Figura N° 1. Ferrita Widmannstätten en un acero comercial de 0.44%C en peso. Notar que las placas forman ángulos cercanos a 90° entre ellas.

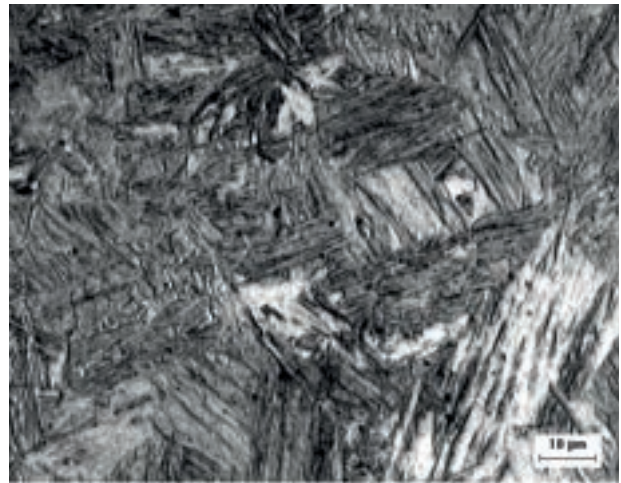


Figura N° 2. Martensita en estado "templada en agua" de un acero comercial con 0.2%C en peso.

<sup>1</sup>  $\{ \}$  y  $\langle \rangle$  representan familia de planos y de direcciones, respectivamente. Se entiende por familia a todas las posibles permutaciones equivalentes de un set de índices hkl.

## Definiendo una relación de orientación

Primero que todo es necesario proponer una posible relación de orientación que explique la observación descrita en la Figura N° 1. La estructura cúbica de la ferrita tiene una relación de ortogonalidad entre sus planos basales  $\{100\}_\alpha$ , por lo tanto es razonable pensar que la dirección de crecimiento normal a los planos basales resultaría en placas orientadas a  $90^\circ$  entre sí. La idea de una dirección de crecimiento  $\langle 100 \rangle$  no es necesariamente hipotética, ya que se ha observado experimentalmente que el crecimiento de una dendrita en el líquido es la misma  $\langle 100 \rangle$ . Una transformación de fase sólido/sólido tipo FCC  $\rightarrow$  BCC podría mostrar esa dirección de crecimiento si es que la relación de orientación existente coincidiera con la propuesta por Bain,  $\{001\}_\gamma // \{001\}_\alpha$ ,  $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 001 \rangle_\alpha$ . La Figura N° 3 muestra esquemáticamente esta relación.

Tenemos hasta el momento una observación experimental que es necesario interpretar y un posible mecanismo que podría ajustarse a la observación realizada. Al plantear la relación de orientación tipo Bain como una posible alternativa a la KS, la pregunta planteada en la introducción da lugar ahora a la formulación de una hipótesis de trabajo específica, que podría plantearse como “El crecimiento de placas de ferrita Widmannstätten se lleva a cabo de acuerdo a la relación de orientación tipo Bain”. A continuación, someteremos esta hipótesis a una evaluación científica.

## Relaciones de orientación en aceros

Es natural pensar que una transformación de fases que ocurre en sólidos puede manifestarse mediante una relación de orientación definida. Es razonable también pensar que estas relaciones de orientación van a ser específicas de cada sistema, dadas las características de las estructuras cristalinas involucradas.

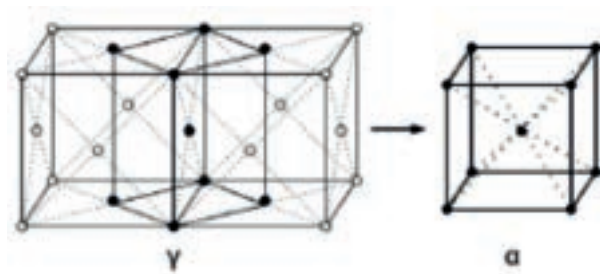


Figura N° 3. Representación esquemática de la relación de orientación de Bain.

Tomando el mismo ejemplo de la orientación tipo Bain en Fe, un grano de austenita que dé origen a una placa de ferrita debe mostrar que los planos  $\{001\}_\gamma$  deben ser necesariamente paralelos al plano  $\{001\}_\alpha$  en alguna de las direcciones  $\langle 001 \rangle_\alpha$  definidas por la relación de orientación. Si la transformación se suscribe a un único grano, o a un monocristal, las posibles combinaciones de la relación de Bain son solamente tres. Estas combinaciones pueden visualizarse con la ayuda de la Figura N° 3, donde solo hay tres posibles planos basales de ferrita para un único plano basal de la austenita y cada uno de estos planos basales solamente tiene una posible combinación independiente  $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 001 \rangle_\alpha$ . Por lo tanto  $3 \times 1 = 3$  permutaciones posibles. Esquemáticamente, si el grano de austenita se define con una orientación  $g_1$ , de acuerdo a la relación de orientación de Bain solo pueden existir tres posibles relaciones de orientaciones en la ferrita Widmannstätten,  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$ . La Figura N° 4 representa la situación descrita anteriormente mediante las flechas sólidas. En una microestructura observada metalográficamente (cf. Figuras N° 1 y N° 2) a temperatura ambiente es extremadamente complejo medir las orientaciones de la austenita, ya que esta fase es inestable. Es mucho más probable encontrar el caso opuesto, donde es posible observar las orientaciones de los productos de transformación. Por lo tanto, nos encontramos en una situación donde el dato experimental nos debe conducir a determinar la orientación del grano austenítico mediante alguna metodología que correla-

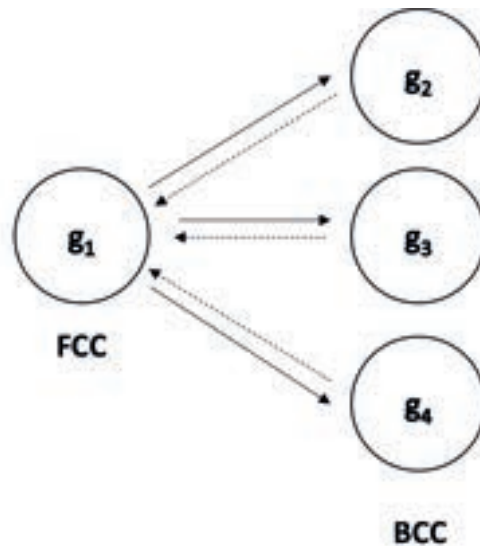


Figura N° 4. Combinaciones posibles para un grano de austenita de orientación  $g_1$  que solamente puede dar origen a placas de ferrita de orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$  y  $g_4$  de acuerdo a la relación de Bain.

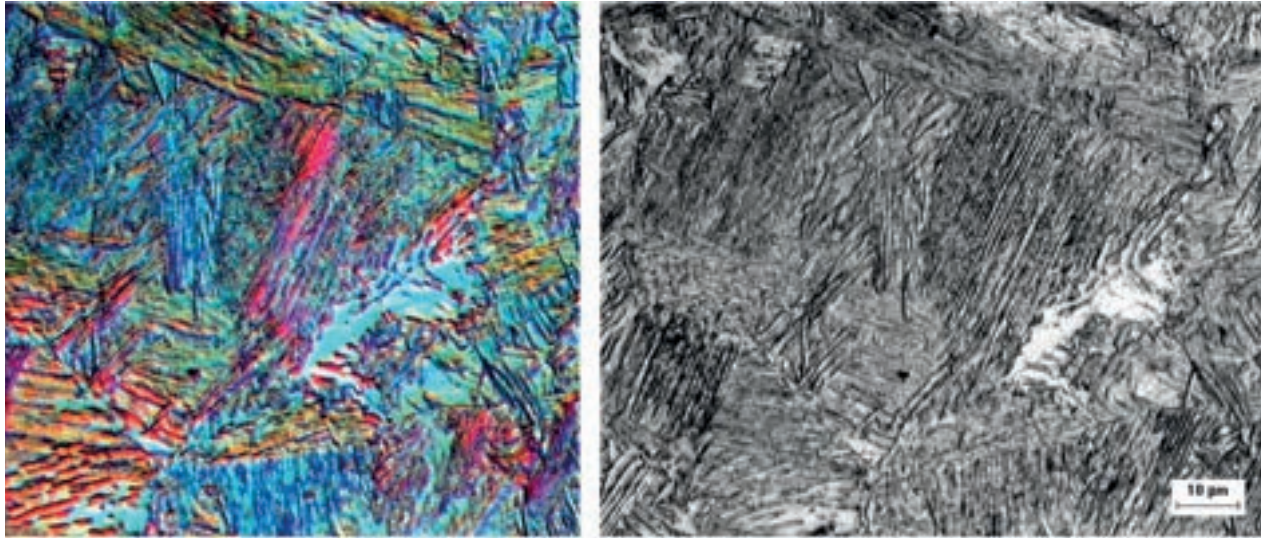


Figura N° 5. Ferrita Widmannstätten en un acero de 0.2%C en peso. La imagen muestra el contraste cristalográfico que se obtiene al aplicar luz polarizada ligeramente oblicua (izquierda) en la misma área iluminada con luz directa (derecha). La imagen de la izquierda fue post-procesada con un ajuste de brillo y contraste digital automático (ImageProPlus).

cione las orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$ ; y que entregue como resultado  $g_1$  (seguir la dirección de las flechas segmentadas de acuerdo al esquema de la Figura N° 4). Imaginemos que se determinan inequívocamente las orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$  en las placas de ferrita circunscritas en un único grano de austenita de orientación desconocida mediante alguna técnica experimental (suponer que se conocen las orientaciones de las placas de ferrita Widmannstätten de la Figura N° 1). Las placas de orientación  $g_2$  tendrán solamente 3 posibles orientaciones del grano de austenita:  $g^{(i)}_2$ ,  $g^{(ii)}_2$ , y  $g^{(iii)}_2$ . Si se repite este ejercicio para las placas de orientación  $g_3$  y  $g_4$ , se tendría un total de nueve posibles orientaciones del grano original de austenita. Lo que resta ahora es encontrar cuál de esas nueve posibles orientaciones es común a las tres orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$  de las placas de ferrita Widmannstätten circunscritas al único grano de austenita, que corresponde a la solución original  $g_1$ . Esta metodología tiene la restricción inherente a la resolución un problema lineal de  $n$  incógnitas, donde se requieren  $n$  ecuaciones independientes (i.e.: se requiere que cada grano de austenita presente como mínimo tres orientaciones diferentes de las placas de ferrita Widmannstätten). Con la metodología anteriormente descrita, solo resta ahora enfocar el estudio a la determinación experimental de las orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$  de las placas de ferrita Widmannstätten.

## Mediciones experimentales de orientación

Es evidente que hemos agotado al máximo la información que la microscopía óptica puede entregar respecto al crecimiento de placas tipo Widmannstätten. El principio físico de reflexión de luz visible solo permite diferenciar cualitativamente las orientaciones de un grano respecto a otro, mediante la aplicación de modos de iluminación específicos, filtros y polarizadores. En el contexto de la descripción anterior, en el mejor de los casos la microscopía óptica permitiría bajo ciertas circunstancias específicas diferenciar si es que  $g_2 \neq g_3$ , tal como se muestra en la Figura N° 5. Este caso es todavía más complejo de obtener experimentalmente en estructuras cúbicas simples, como la BCC, y requiere de un cuidadoso ajuste de las condiciones operativas del microscopio óptico. La razón de esta dificultad es que, incluso en planos de índices de Miller irracionales, la densidad atómica planar no varía considerablemente para que se detecte un contraste considerable de luz visible.

Se requiere una técnica basada en un principio físico distinto que permita determinar la orientación cristalográfica de cada grano. La técnica seleccionada para este estudio es la difracción de electrones retrodispersados, o EBSD. El principio de funcionamiento de esta medición se basa en la difracción de los electrones del haz incidente y la medición de los

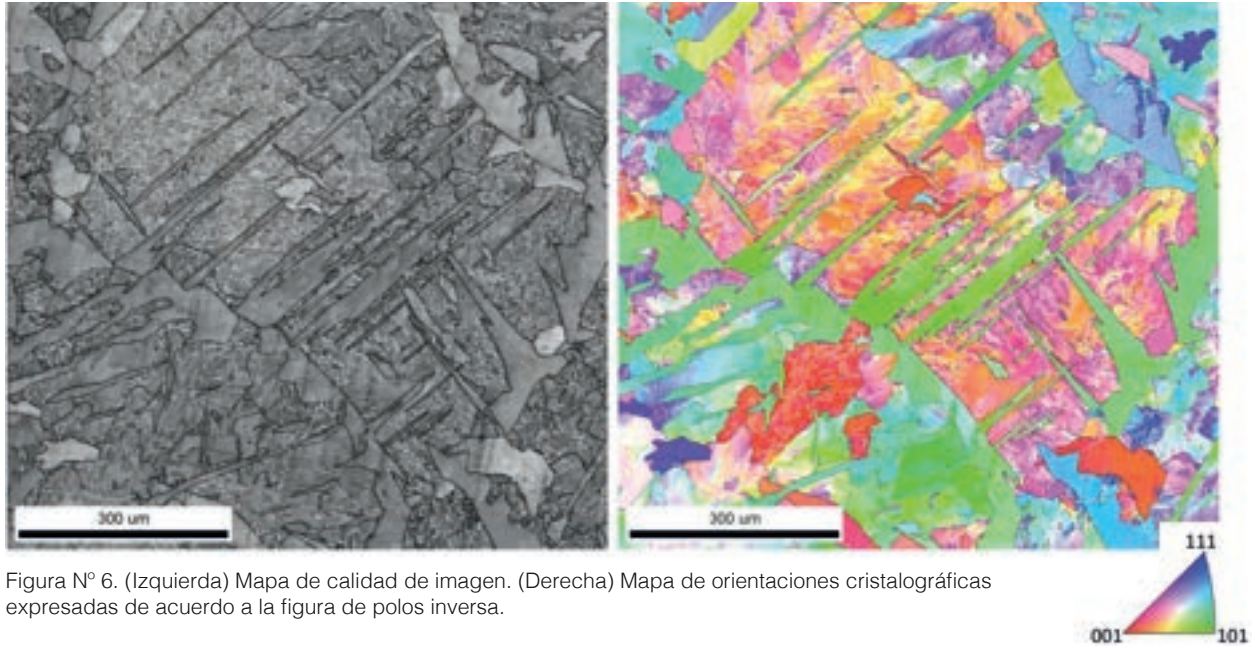


Figura N° 6. (Izquierda) Mapa de calidad de imagen. (Derecha) Mapa de orientaciones cristalográficas expresadas de acuerdo a la figura de polos inversa.

patrones capturados por el detector (patrones Kikuchi). Los patrones Kikuchi son el resultado de la parte del haz que cumple la ley de Bragg al producir una interferencia constructiva con la región de la superficie sobre la cual se proyecta; por lo tanto, contienen información cristalográfica de dicha superficie. Los patrones Kikuchi son analizados para determinar (i) el tipo de estructura y (ii) la rotación de la celda unitaria respecto a un sistema de referencia externo (i.e. la orientación del cristal). Para el presente análisis se utilizó un sistema marca TSL-OIM montado en un microscopio FEG-SEM marca FEI modelo Quanta 450 equipado con un filamento de emisión de campo. La medición se realizó en una muestra preparada metalográficamente mediante lijado y pulido estándar hasta pasta de diamante de diámetro 1  $\mu\text{m}$ . La etapa final de pulido se realizó con una mezcla de sílica coloidal en solución levemente básica (tipo OP-U, marca Struers) por 45 minutos. La medición se realizó a una distancia de trabajo de 16 mm sobre una muestra rotada 70° respecto a la horizontal. Las imágenes se obtuvieron a través de un mallado hexagonal con un paso de 1.5  $\mu\text{m}$ , siendo el tamaño total del barrido dependiente de la zona de medición. Se midieron aproximadamente 10 granos austeníticos, equivalentes a una superficie de  $\sim 10 \text{ mm}^2$ . La información cristalográfica fue post-procesada utilizando el sistema EDAX-TSL-OIM-Data Collection (version 8), procediendo a eliminar los puntos de medición con un índice de

confiabilidad (CI) menor al 0.1. No se aplicó ningún otro tipo de limpieza o modificación de los patrones indexados.

Los datos obtenidos mediante EBSD pueden ser expresados en imágenes con distintos tipos de información. La Figura N° 6 (izquierda) muestra una imagen que contiene información respecto a la calidad del patrón, lo que quiere decir que se asigna un valor numérico a este parámetro, al que posteriormente se le asigna una escala de brillo en escala de grises a cada pixel de la imagen. En la figura, se observa que las fases y constituyentes tienen tonalidades de gris relativamente homogéneas. Se observan, además, líneas blancas y negras, que corresponden a bordes de grano de bajo ángulo (menor a 15°) y de alto ángulo (mayor a 15°), respectivamente. La Figura N° 6 (derecha) muestra información respecto a la orientación cristalográfica de cada punto, en este caso la orientación cristalina se asocia al color de cada pixel de acuerdo a la leyenda de la parte inferior derecha de la imagen. Este tipo de mapa permite reconocer y definir granos mediante la selección de un criterio, como por ejemplo la rotación que existe entre un punto y otro. Para poder definir una orientación cristalográfica, primero se define un sistema de referencia externo en coordenadas cartesianas. Luego, cada medición de orientación es expresada en términos de la rotación necesaria para hacer coincidir el sistema de referencia externo con el sistema de referencia de la celda cristalina a la

que corresponde el patrón. Después, mediante la aplicación de álgebra lineal, el set de rotaciones en el espacio puede transformarse en coordenadas cartesianas y luego a índices de Miller. En el caso de la Figura N° 6, los colores representan la proximidad de cada grano a cada eje de simetría de la estructura cúbica, donde los colores rojo, verde y azul representan orientaciones cercanas a los polos  $\{100\}$ ,  $\{110\}$ , y  $\{111\}$ , respectivamente. De esta manera, por ejemplo, las placas Widmannstätten de color verde dentro del grano original de austenita representan orientaciones cercanas al eje  $\{110\}$  paralelo al plano de observación.

Mediante la técnica EBSD es posible obtener inequívocamente las orientaciones  $g_2$ ,  $g_3$ , y  $g_4$  de las placas de ferrita, cumpliendo así el requerimiento para determinar  $g_1$  y evaluar la hipótesis planteada a través de la metodología expresada en la sección anterior.

## Relación de orientación en la ferrita Widmannstätten

En el caso del presente estudio y tratándose de un número relativamente pequeño de granos y orientaciones involucradas, es razonable intentar resolver el problema mediante cálculos manuales. Sin embargo, otro tipo de problemas que involucran miles de orientaciones distintas y un número de permutaciones de relaciones de orientación del orden de las docenas (la relación KS tiene 24 variantes, por ejemplo) hacen que el problema sea impracticable de resolver sin la ayuda de herramientas computacionales. En virtud de la generalidad del problema,

el grupo de investigación del Prof. Leo Kestens en Gent, Bélgica, desarrolló un código que permite realizar los cálculos de reconstrucción de la orientación original del grano FCC mediante la determinación de las orientaciones de los granos BCC y la metodología descrita en la Sección 3 (al final del presente trabajo se encuentra la bibliografía asociada al trabajo citado).

Para el caso de la orientación cristalográfica de la ferrita Widmannstätten, la hipótesis de trabajo no arrojó solución. Esto significa que si el grano de austenita se reconstruye considerando la orientación de Bain entonces no se obtiene coincidencia de un grano común, por lo tanto, no puede ser la relación de orientación verdadera. Se probó, además, utilizando el mismo código y los mismos datos, la información bibliográfica original que indica que la relación de orientación entre las placas de ferrita y la austenita es la KS. En este caso, si existe una solución aceptable dentro de una tolerancia angular de  $5^\circ$ . Los resultados pueden resumirse en la siguiente tabla.

Relación de orientación	Solución
Bain	No existe
Kurdjumov – Sachs	Existe

Tabla N° 1. Resultados de la reconstrucción de la orientación original FCC a partir de las orientaciones BCC y la definición de una relación de orientación.

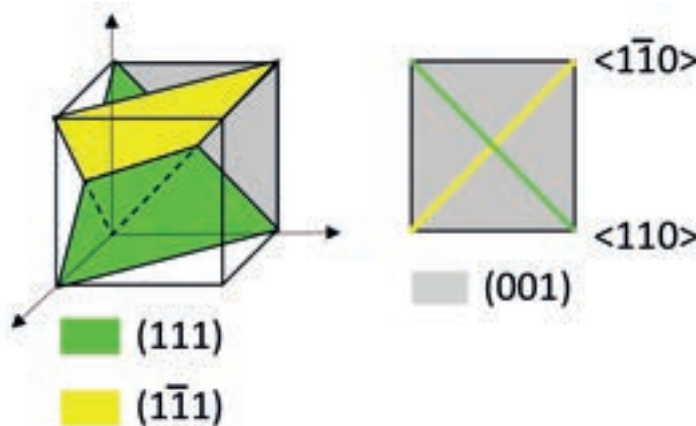


Figura N° 7. Posible variante de la relación KS en la austenita responsable por la observación de placas de ferrita Widmannstätten orientadas cerca de  $90^\circ$  entre sí.

## Discusión

Los resultados apuntan a la conclusión evidente que la relación de orientación corresponde a la KS. ¿Cómo puede explicarse entonces el ángulo cercano a  $90^\circ$  que se observa en la Figura N° 1? Una posible respuesta a esta interrogante se encuentra considerando dos planos tipo  $\{111\}$ , en los cuales proyectando las direcciones ortogonales  $\langle 110 \rangle$  en una de las caras basales de la estructura cúbica produciría un ángulo de  $90^\circ$ . Si el crecimiento de la placa de ferrita Widmannstätten se lleva a cabo de acuerdo a esta variante de la relación KS, se puede esperar que existan ciertos planos de observación que van a coincidir con la proyección mostrada en la Figura N° 7.

## Conclusiones

La relación de orientación de la ferrita Widmannstätten corresponde a la de Kurdjumov –Sachs,  $\{111\}_\gamma // \{110\}_\alpha$ ,  $\langle 110 \rangle_\gamma // \langle 111 \rangle_\alpha$ . Las mediciones de orientación realizadas mediante la técnica de análisis de difracción de electrones retrodispersados permitieron reconstruir la orientación cristalográfica de

cada grano de austenita, considerando una determinada relación de orientación. No se encontró una solución para la relación de Bain, pero el problema muestra una solución única cuando se considera la relación tipo KS.

## Agradecimientos

El presente trabajo fue parcialmente financiado con la ayuda de la Dirección de Ciencia y Tecnología (Dicyt) de la Universidad de Santiago de Chile, mediante el proyecto regular código 052114CC. El autor expresa su gratitud al Prof. Leo Kestens, Ghent University, Bélgica por facilitar el equipamiento y el software para realizar las mediciones, y al Dr. Tuan Nguyen-Minh, CRM-Group, Gent, Bélgica, por realizar los cálculos computacionales de reconstrucción cristalográfica. Se agradece al Prof. M. Cabrera de la Universidad Federico Santa María por proporcionar una muestra de material. Se agradecen los comentarios respecto al texto de los Profesores L. Carvajal y B. Schulz, Universidad de Santiago de Chile.

## Referencias

H.I. Aaronson, The proeutectoid ferrite and the proeutectoid cementite reactions, in: V.F. Zackay, H.I. Aaronson (Eds.), *Decompos. Austenite by Diffus. Process.*, Metallurgical society of AIME, 1962.

G. Spanos, A.W. Wilson, M. V Kral, New insights into the Widmannstätten proeutectoid ferrite transformation: Integration of crystallographic and three-dimensional morphological observations, *Metall. Mater. Trans. A*. 36 (2005) 1209–1218. <https://doi.org/10.1007/s11661-005-0213-1>.

Para una revisión de las texturas asociadas a transformaciones de fase en aceros se sugiere:  
R.K. Ray, J.J. Jonas, *Transformation Textures in Steels*, *Int. Mater. Rev.* 35 (1990) 1–36.

L.A.I. Kestens, H. Pirgazi, Texture formation in metal alloys with cubic crystal structures, *Mater. Sci. Technol.* 32 (2016) 1303–1315. <https://doi.org/10.1080/02670836.2016.1231746>.

Finalmente, la descripción del código utilizado para calcular las orientaciones en la austenita puede encontrarse en

E. Gomes, L.A.I. Kestens, Fully automated orientation relationship calculation and prior austenite reconstruction by random walk clustering, *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 82 (2015) 12059. <http://stacks.iop.org/1757-899X/82/i=1/a=012059>.

E. Gomes, H. Pirgazi, M. Sanjari, M. Mohammadi, L.A.I. Kestens, Automated reconstruction of parent austenite phase based on the optimum orientation relationship, *J. Appl. Crystallogr.* 54 (2021) 569–579. <https://doi.org/10.1107/S1600576721001394>.