



# INFLUÊNCIA DA TEXTURA EM MEDIDAS DE TENSÃO RESIDUAL

**NELSON BATISTA DE LIMA**

Tese apresentada como parte dos  
requisitos para obtenção do Grau de  
Doutor em Tecnologia Nuclear.

**Orientador:** Dr. Kengo Imakuma

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de registrar meus sinceros agradecimentos às pessoas que colaboraram na execução desse trabalho:

Ao *Dr. Kengo Imakuma* pela orientação, oportunidade e liberdade de trabalho.

À *Msc. Liana M. F. Guimarães Mitteregger* pelo carinho, compreensão, incentivo e companheirismo em todas as etapas do programa de doutorado, além da revisão dos textos.

Ao *Msc. Antonio A. Couto* pela amizade e companheirismo

Às amigas sempre presentes, as quais eu adoro : *Dolores, Julia, Lia, Emília, Vera...*

Aos amigos aos quais eu prezo muito: *Scapin, Paschoal, Nildemar, Celso, Paulo, Luiz, Egberto, Sérgio...*

À *Marilene M. Serna* , pela paciência para digitar este trabalho.

À *Emilia K. Nakamura, Vanda K. de Moraes e Antonio S. de Gouvea* pelo apoio no desenvolvimento dos programas.

À *Acesita* na pessoa do *Msc. Adonis M. S. Saliba* pelas amostras de aço.

À *Metal Leve Indústria e Comércio* na pessoa de *Antonio Joaquim* pela possibilidade de utilização de suas instalações.

Ao *Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares IPEN-CNEN/SP*, pela oportunidade de realizar este trabalho.

À *Banca Examinadora, Fernando A. Padilha, Luis F.C.P. de Lima, Silvio R. Teixeira e Gustau L. Ferran*, pelos cuidados na correção e valiosas sugestões.

À todos os colegas e funcionários do *IPEN-CNEN/SP* que contribuíram para a realização deste trabalho.

# INFLUÊNCIA DA TEXTURA EM MEDIDAS DE TENSÃO RESIDUAL

NELSON BATISTA DE LIMA

## RESUMO

Foi desenvolvido um programa computacional para cálculo da função distribuição de orientações (FDO), a partir de figuras de polo incompletas para materiais laminados com estrutura cristalina cúbica. Este programa baseia-se no método de expansão em série proposto por Bunge. A utilização de figuras de polo incompletas resulta na perda da ortogonalidade entre as funções harmônicas esféricas simétricas, tornando-se necessário avaliar estas integrais explicitamente.

Aplica-se a FDO para avaliar quantitativamente a influência da textura na determinação da tensão residual, calculando-se teoricamente a deformação sofrida por cada célula unitária em função de sua relação de orientação com a própria tensão residual.

Para testar o programa para cálculo da FDO foram utilizadas amostras de cobre e alumínio laminadas a frio. Para avaliação da tensão residual em função da textura foram utilizados aços tipo 430 e 324 também laminados a frio.

Além disso, são apresentadas simulações, a partir da textura de cada material analisado, para verificação do comportamento da curva  $d \times \sin^2 \psi$  em função de cada componente do tensor de tensão.

# THE INFLUENCE OF TEXTURE ON RESIDUAL STRESS MEASUREMENTS

NELSON BATISTA DE LIMA

## ABSTRACT

A computer program to calculate the orientation distribution function (ODF) from incomplete pole figures has been developed for rolled materials with a cubic structure. This program is based on Bunge's series expansion. The use of incomplete pole figures results in the loss of orthogonality among symmetric spherical harmonic functions and makes it necessary to explicitly evaluate the integrals.

The ODF has been used to quantitatively evaluate the influence of texture in determining residual stresses. This has been done by calculating theoretically the strain undergone by each cell as a function of its orientation to residual stress relationship.

To test the ODF program, cold rolled Cu and Al specimens were used and to evaluate residual stresses as a function of texture, cold rolled AISI 430 and 324 specimens were used.

Simulations have also be presented based on the texture for each of the materials, to verify the nature of the curve  $d \times \sin^2 \psi$  as a function of each stress tensor components.

## ÍNDICE GERAL

<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO I - FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	
I.1 <b>Introdução</b>	<b>4</b>
I.2 <b>Tensões Planares</b>	<b>7</b>
I.3 <b>Tensões de Cisalhamento</b>	<b>10</b>
I.4 <b>Tensão Normal</b>	<b>11</b>
I.5 <b>Textura</b>	
I.5.1 <b>Influência nas Constantes Elásticas</b>	<b>12</b>
I.5.2 <b>Textura - Método Analítico</b>	<b>18</b>
I.5.3 <b>Otimização das Variáveis</b>	<b>25</b>
I.5.4 <b>Texturas de Deformação</b>	<b>29</b>
I.6 <b>Transformação de fase <math>\gamma \rightarrow \alpha'</math></b>	<b>35</b>
I.7 <b>Influência da energia de falha de empilhamento na           medida do parâmetro de rede</b>	<b>36</b>
<b>CAPÍTULO II - DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA COMPUTACIONAL</b>	
II.1 <b>Programa "BIBLIOTECA"</b>	<b>38</b>
II.2 <b>Programa "NELSON"</b>	<b>41</b>
II.3 <b>Programa "CLMINI"</b>	<b>42</b>
II.4 <b>Programa "FDO"</b>	<b>43</b>
II.5 <b>Programa "EULER"</b>	<b>44</b>
<b>CAPÍTULO III - PARTE EXPERIMENTAL</b>	
III.1 <b>Materiais utilizados</b>	<b>47</b>
III.2 <b>Medidas de difração de raios-X</b>	<b>48</b>
III.3 <b>Medidas de tensão residual</b>	<b>48</b>
III.4 <b>Geometria das medidas</b>	<b>49</b>
III.5 <b>Alinhamento do difratômetro</b>	<b>50</b>
III.6 <b>Posicionamento da amostra</b>	<b>50</b>
III.7 <b>Determinação da posição do pico</b>	<b>52</b>
III.8 <b>Medidas de textura</b>	<b>52</b>

<b>CAPÍTULO IV - RESULTADOS E ANÁLISE DE DADOS</b>	
<b>IV.1 Função distribuição de orientações</b>	<b>55</b>
<b>IV.1.1 Análise das amostras de cobre</b>	<b>55</b>
<b>IV.1.2 Análise das amostras de alumínio</b>	<b>60</b>
<b>IV.1.3 Análise das amostras de aço</b>	<b>67</b>
<b>IV.2 Avaliação da tensão residual</b>	<b>81</b>
<b>IV.2.1 Tensão <math>\sigma_{33}</math></b>	<b>85</b>
<b>IV.2.2 Tensão <math>\sigma_{12}</math></b>	<b>85</b>
<b>IV.2.3 Tensão <math>\sigma_{13}</math></b>	<b>85</b>
<b>IV.2.4 Tensão <math>\sigma_{23}</math></b>	<b>85</b>
<b>IV.3 Simulação para os aços</b>	<b>88</b>
<b>IV.3.1 Tensão <math>\sigma_{33}</math></b>	<b>88</b>
<b>IV.3.2 Tensão <math>\sigma_{12}</math></b>	<b>88</b>
<b>IV.3.3 Tensão <math>\sigma_{13}</math></b>	<b>88</b>
<b>IV.3.4 Tensão <math>\sigma_{23}</math></b>	<b>93</b>
<b>IV.4 Comparação entre os dados experimentais e teóricos</b>	<b>93</b>
<b>CAPÍTULO V - CONCLUSÕES</b>	<b>98</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>100</b>
<b>APÊNDICE A</b>	

## INTRODUÇÃO

Durante a conformação mecânica, como no caso particular da laminação, geralmente, é introduzida uma tensão de compressão na região próxima à superfície do material. Além disso, sob certas condições, aparecerá uma tensão de tração nesta região<sup>(1)</sup>.

Um material conformado plasticamente, apresenta deformações elásticas internas que podem ser detectadas por difração de raios-X, já que estas deformações causam variações no parâmetro de rede da estrutura cristalina.

O procedimento para determinação de tensão residual por difração de raios-X é bem conhecido, tendo, seus princípios básicos, sido descritos por vários autores<sup>(2,3,4,5)</sup>. Através da técnica de difração, a deformação é obtida pela medida de  $\Delta d/d_0$ , que fornece a razão da variação da distância interplanar pela distância interplanar livre de deformação, e é convertida em tensão, segundo equações derivadas da teoria da elasticidade. Embora as vantagens e limitações da determinação da tensão pelo método de difração de raios-X sejam bem conhecidas<sup>(2,4,5)</sup>, três fatos inerentes à técnica e importantes para a discussão devem ser reiterados aqui. Primeiramente, não se deve utilizar para a determinação da constante elástica do material, aquelas obtidas por meios mecânicos, já que estas não são aplicáveis às medidas de tensão residual por raios-X. Deve-se utilizar a técnica de difração de raios-X, pela qual se obtém as chamadas constantes elásticas de raios-X, ou "CERX"<sup>(5)</sup>. Em segundo lugar, a deformação medida pela variação do ângulo de Bragg, representa um valor médio de grãos do agregado policristalino orientados corretamente em relação ao feixe. Desta maneira, a técnica de raios-X é seletiva e, através do uso de diferentes picos de difração, a deformação para famílias de planos pode ser determinada<sup>(6)</sup>. Outro ponto importante refere-se à anisotropia dos materiais, nos quais a conversão da deformação em equivalente tensão, implica que o sistema de tensões residuais seja essencialmente uniforme em todos os grãos irradiados<sup>(7)</sup>.

Um dos efeitos que mais afeta a acurácia na determinação de tensão residual por difração de raios-X é a existência de orientações cristalográficas preferenciais, ou seja, textura, nos materiais examinados. A presença de textura, que é causa da oscilação no gráfico de  $d \times \sin^2\psi$ , pode levar a erros significativos quando se utiliza as equações derivadas da teoria elástica para materiais isotrópicos na determinação da tensão residual.

Nos últimos anos muitos trabalhos tem sido feitos para corrigir estes efeitos, particularmente envolvendo técnicas experimentais<sup>(8)</sup>. Revisões destes trabalhos são apresentadas por Dolle<sup>(9)</sup> e Hauk<sup>(3)</sup>. Dentre estes, os trabalhos realizados por Dolle e Cohen<sup>(10)</sup>, Dolle<sup>(9)</sup> e Penning e Brakman<sup>(11)</sup>, que relacionam a deformação da rede com as constantes elásticas e os ângulos  $\psi$  e  $\phi$  em materiais anisotrópicos, são os de maior potencial, embora a avaliação da tensão de deformação deva ser realizada para cada sistema de um material específico<sup>(8)</sup>.

Para se avaliar a influência da textura em medidas de tensão residual é necessário o conhecimento da função distribuição de orientações. Esta função nos fornece a fração volumétrica de grãos orientados no material<sup>(12)</sup>, a partir da qual se quantifica a anisotropia das propriedades físicas dos materiais.

A função distribuição de orientações é resultado do processamento de dados obtidos através de figuras de polo, que podem ser completas ou incompletas.

O conceito de função distribuição de orientações foi introduzido por Bunge e Roe<sup>(12)</sup>, a partir de 1960. Dentro deste método é possível caracterizar componentes de textura com maior precisão, além de descrever quantitativamente estas componentes. Isto não era possível através de figuras de polo. Do ponto de vista matemático o problema conduz ao cálculo, por meio de computadores,

de uma função composta por três variáveis.

O objetivo deste trabalho baseia-se no desenvolvimento de um programa computacional para calcular a função distribuição de orientações de chapas laminadas, a partir de figuras de polo incompletas, além da utilização desta função para avaliar a influência da textura nas medidas de tensão residual, calculando a deformação sofrida por cada célula unitária de materiais cúbicos em função de sua orientação.

# CAPÍTULO I - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

## I.1 - INTRODUÇÃO

A técnica de difração de raios-X pode ser usada para medidas não destrutivas de tensão residual. Para este tipo de medida é necessário utilizar, apenas, uma pequena área de determinado material restringindo-se praticamente à sua superfície.

O método baseia-se na medida da distância interplanar média  $\langle d_{hkl} \rangle$  para vários ângulos  $\phi$  e  $\psi$  em relação ao feixe incidente de raios-X, conforme mostra a Figura I.1. O valor de tensão é calculado indiretamente pela medida da deformação de um conjunto particular de planos cristalográficos  $\{hkl\}$ . Além disso, a medida é seletiva, uma vez que, somente aqueles grãos ou subgrãos corretamente orientados com o feixe e o detector contribuem para a formação do perfil de difração. Ambos os fatores tornam a constante elástica, que relaciona a deformação com a tensão, uma função de um particular conjunto de planos  $\{hkl\}$  e de sua orientação cristalográfica. Portanto, mesmo para materiais isotrópicos, a dependência com  $\{hkl\}$  existe e esta é uma das razões práticas, pela qual as constantes elásticas utilizadas devem ser as constantes elásticas de raios-X (CERX) e não, as obtidas por ensaios mecânicos.

A equação básica que relaciona tensão  $\sigma_{kl}$  e deformação  $\epsilon_{ij}$  é:

$$\epsilon_{ij} = \sum_k \sum_l s_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (I.1)$$

onde  $s_{ijkl}$  é o tensor de compliança, sendo esta equação conhecida como lei de Hooke generalizada.

O tensor de compliança, de ordem 4, representa as constantes elásticas do material, e para um sólido tridimensional,

a princípio, seriam necessárias 81 constantes independentes. Entretanto, por propriedades de simetria dos tensores, este número se reduz a 21 constantes independentes para um corpo cristalino em geral<sup>(13)</sup>.

No caso de um monocristal de simetria cúbica este número diminui para 3 constantes independentes designadas por  $s_{1111}$ ,  $s_{1122}$  e  $s_{1212}$  e portanto, os outros elementos do tensor de elasticidade são combinações lineares destes três. Para o caso de um policristal isotrópico, basta considerar duas constantes  $\langle s_{1111} \rangle$  e  $\langle s_{1212} \rangle$  sendo  $\langle s_{1212} \rangle = 1/2(\langle s_{1111} \rangle - \langle s_{1122} \rangle)$ , onde o símbolo " $\langle \rangle$ " representa o valor médio do tensor.

Estas constantes se relacionam com o módulo de Young  $E$  e a razão de Poisson  $\nu$ , da seguinte forma<sup>(1,2,3,9,14)</sup>:

$$\langle s_{1111} \rangle = 1/E$$

$$s_1 = \langle s_{1122} \rangle = -\frac{\nu}{E} \quad (I.2)$$

$$\langle s_{1111} \rangle - \langle s_{1122} \rangle = 2\langle s_{1212} \rangle = ((1+\nu)/E) = 1/2 s_2$$

onde os valores  $\nu$  e  $E$  são obtidos por ensaios mecânicos, que por sua vez, fornecem os valores médios das constantes elásticas.

As constantes elásticas de um material isotrópico são medidas, por difração de raios-X, através da variação da distância interplanar de um plano (hkl) de um corpo submetido a diferentes tensões, segundo a equação<sup>(7)</sup>:

$$\frac{\partial c_{\phi\psi}}{\partial \sin^2\psi} = \frac{1}{d_0} \frac{\partial d}{\partial \sin^2\psi} = \frac{-\cot\theta}{2} \cdot \frac{\partial(2\theta_{\phi\psi})}{\partial \sin^2\psi} = 1/2 s_2(hkl) \sigma_{\phi} = n^* \quad (I.3)$$

e pela equação:

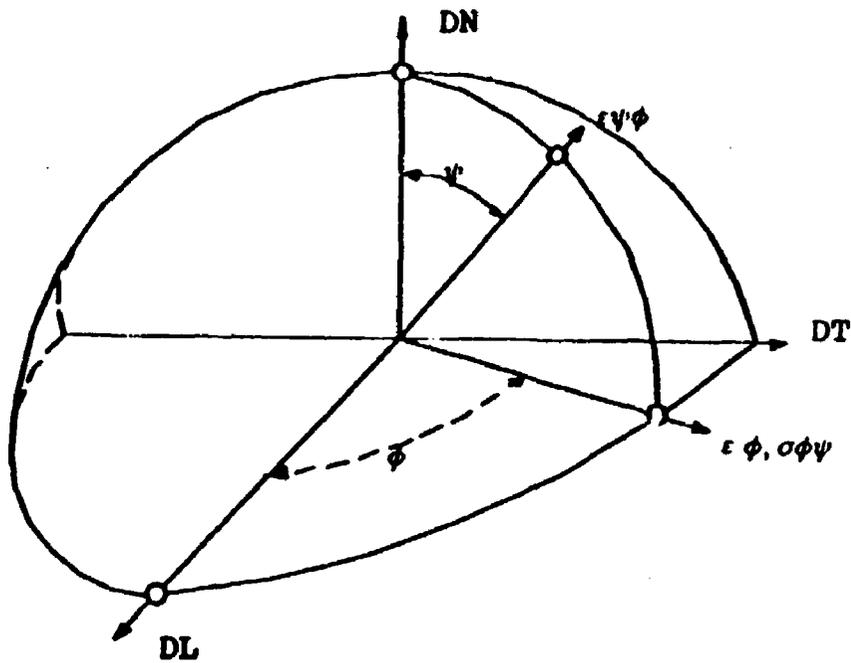


FIGURA I.1 - Definição dos ângulos  $\phi$  e  $\psi$  em relação ao sistema de coordenadas da amostra DL, DN e DT.

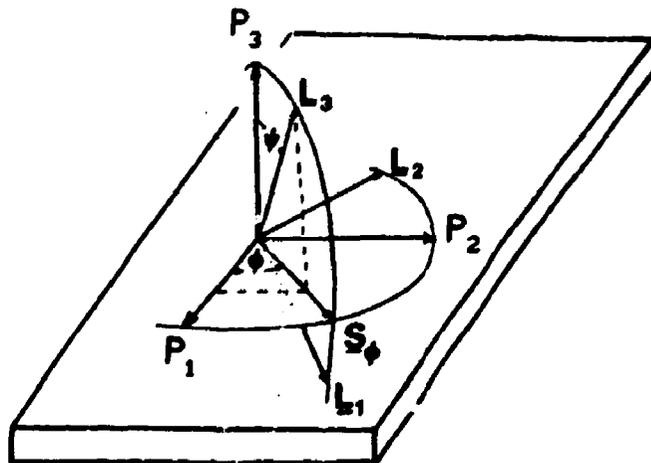


FIGURA I.2 - Sistema de coordenadas do laboratório ( $L_i$ ) em relação ao sistema da amostra ( $P_i$ ).

$$c_{\phi\psi=0} = (1/d_0)(d_{\phi\psi=0} - d_0) = s_1(hkl) (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (I.4)$$

donde se conclui que as constantes elásticas são função do plano cristalográfico.

Reuss<sup>(9)</sup>, propõe uma relação entre estas constantes e as do monocristal da seguinte forma:

$$s_{1111}^R(hkl) = \tilde{s}_{1111} - 2 \tilde{s}_0 \Gamma \quad (I.5)$$

$$s_{1122}^R(hkl) = s_1^R(hkl) = \tilde{s}_{1122} + \tilde{s}_0 \Gamma \quad (I.6)$$

$$2 s_{1212}^R(hkl) = 1/2 s_2^R(hkl) = (\tilde{s}_{1111} - \tilde{s}_{1122} - 3 \tilde{s}_0 \Gamma) \quad (I.7)$$

com

$$\tilde{s}_0 = \tilde{s}_{1111} - \tilde{s}_{1122} - 2\tilde{s}_{1212}$$

$$\Gamma = (h^2 k^2 + k^2 l^2 + h^2 l^2) / (h^2 + k^2 + l^2)^2$$

e onde o símbolo "--" refere-se à compliança do monocristal.

É importante notar que para qualquer valor de  $\Gamma$ , as relações (I.5) a (I.7) sempre são válidas para materiais policristalinos e que, os valores obtidos por Reuss só tem sentido se comparados com os valores medidos de CERX<sup>(5,14)</sup>. Para planos cristalográficos, onde  $\Gamma = 0,2$  os valores obtidos pela aproximação de Reuss devem ser coerentes com os obtidos por ensaios mecânicos em materiais isotrópicos.

## I.2 - TENSÕES PLANARES

Para desenvolver a equação básica que relaciona deformação e tensão é necessário escrever as tensões em função de um sistema de coordenadas. O sistema escolhido, geralmente, é o de coordenadas ortonormais coincidentes com os eixos principais da amostra, ou seja, direção de laminação (eixo  $P_1$ ), direção

transversal (eixo  $P_2$ ) e direção normal (eixo  $P_3$ ), (vide Figura I.2), de modo que:

$$P_i \times P_j = \delta_{ij} \quad \text{com} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ 1 & \text{se } i = j \end{cases} \quad (\text{I.8})$$

Quando a medida é efetivada utiliza-se um sistema de eixos que é o do laboratório, isto é, os eixos  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$ , ou simplesmente  $L_i$ , de modo que:

$$\sigma'_{ij} = W_{ik} W_{jl} \sigma_{kl} \quad (\text{I.9})$$

onde  $\sigma_{kl}$  é o tensor de tensão no sistema  $P_i$ ;  
 $\sigma'_{ij}$  é o tensor de tensão no sistema  $L_i$ ;

e:

$$\varepsilon'_{ij} = W_{ik} W_{jl} \varepsilon_{kl}$$

onde  $\varepsilon_{ij}$  é o tensor de deformação no sistema  $P_i$ ;  
 $\varepsilon'_{ij}$  é o tensor de deformação no sistema  $L_i$ ;

$W_{3 \times 3}$  é a matriz de transformação de coordenadas  $P_i$  em  $L_i$ , dada por

$$W_{3 \times 3} = \begin{bmatrix} \cos\phi \cos\psi & \sin\phi \cos\psi & -\sin\psi \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ \cos\phi \sin\psi & \sin\phi \sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix} \quad (\text{I.10})$$

Foi utilizada a chamada convenção do somatório (também conhecida como convenção de Einstein), que é um recurso utilizado para eliminar o símbolo " $\Sigma$ " e facilitar a manipulação com tensores. Se um subíndice aparece duas vezes em um produto de quantidades com subíndices, quer sejam ou não tensores, então está automaticamente subentendida uma soma em relação ao índice repetido.

Utilizando as equações (I.1), (I.2) e (I.9), obtém-se:

$$\begin{aligned}
 (d_{\phi\psi} - d_0) / d_0 = \epsilon'_{33} = & 1/2 s_2(hkl) [\sigma_{11} \cos^2 \phi + \sigma_{12} \sin 2\phi + \sigma_{22} \sin^2 \phi] \sin^2 \psi \\
 & + 1/2 s_2(hkl) \sigma_{33} \cos^2 \psi + s_1(hkl) [\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}] \\
 & + 1/2 s_2(hkl) [\sigma_{13} \cos \phi + \sigma_{23} \sin \phi] \sin 2\psi
 \end{aligned}
 \tag{I.11}$$

em função da tensão e:

$$\begin{aligned}
 \epsilon'_{33} = & \epsilon_{11} \cos^2 \phi \sin^2 \psi + \epsilon_{12} \sin 2\phi \sin^2 \psi + \epsilon_{13} \cos \phi \sin 2\psi \\
 & + \epsilon_{22} \sin^2 \psi \sin 2\psi + \epsilon_{23} \sin \phi \sin^2 \psi + \epsilon_{33} \cos^2 \psi
 \end{aligned}
 \tag{I.12}$$

em função da deformação, onde  $\sigma_{ij}$  e  $\epsilon_{ij}$  são interpretados como valores médios em relação a penetração de raios-X.

Analisando do ponto de vista de tensões superficiais, isto é, um corpo sujeito somente às tensões planares  $\sigma_{11}$  e  $\sigma_{22}$  e livre das componentes de cisalhamento para as quais  $\sigma_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ , a equação (I.11), torna-se:

$$\begin{aligned}
 (d_{\phi\psi} - d_0) / d_0 = \epsilon'_{33} = & 1/2 s_2(hkl) (\sigma_{11} \cos^2 \phi + \sigma_{22} \sin^2 \phi) \sin^2 \psi + \\
 & + s_1(hkl) (\sigma_{11} + \sigma_{22})
 \end{aligned}
 \tag{I.13}$$

que é a equação básica utilizada para medidas de tensão residual. De acordo com esta equação, teríamos uma dependência linear entre  $d_{\phi\psi}$  e  $\sin^2 \psi$ , onde  $\psi$  é o ângulo de inclinação da amostra conforme Figura I.2, e a tensão seria obtida através da declividade da reta. Também através desta equação pode-se calcular as constantes elásticas de raios-X, para cada plano cristalográfico, conforme descrito nas equações (I.3) e (I.4). Para testes de tensão uniaxial, onde  $\sigma_{22} = 0$  e  $\sigma_{11} = \sigma_{apl}$ , estas equações reduziriam-se a:

$$s_1 = \frac{1}{d_0} \frac{\partial d_{\phi=0, \psi=0}}{\partial \sigma_{apl}} \quad \text{e} \quad s_2/2 = \frac{\partial m^{\circ}}{\partial \sigma_{apl}}
 \tag{I.14}$$

A crítica ao uso da equação básica da qual se deriva a

tensão residual e as CERX, está no método de medida por difração de raios-X, que não se restringe somente à superfície do material. Assim, as hipóteses para derivar a equação básica que são:

$$\sigma_{33} = 0 \quad \text{e} \quad \sigma_{1j} = 0, \quad \text{para } j \neq 1$$

geralmente não correspondem a valores reais, devido, principalmente, aos efeitos micro-estruturais, tais como, defeitos na rede cristalina, microtensões, interação entre grãos e textura, que acarretam a não-linearidade entre  $d$  e  $\text{sen}^2\psi$  e portanto, conduzem a erros na determinação das CERX e na tensão residual. Deve-se, então, verificar os efeitos destes fatores na avaliação da tensão residual.

### 1.3 - TENSÕES DE CISALHAMENTO

Quando  $\sigma_{1j} \neq 0$  para  $j \neq 1$ , a equação I.11 possui um comportamento não linear com  $\text{sen}^2\psi$ , sendo também função de  $\text{sen}|2\psi|$  (vide equação I.12). Isto leva a um "split" na distribuição das tensões de deformação para  $\psi > 0$  e  $\psi < 0$ , conforme mostra a Figura I.3. Para avaliar estas tensões, se introduz o valor médio  $a_1$  e o desvio  $a_2$  na equação (I.12), de forma que:

$$\begin{aligned} a_1 &= 1/2 [\epsilon_{\phi\psi+} + \epsilon_{\phi\psi-}] = \frac{d_{\phi\psi+} + d_{\phi\psi-}}{2 d_0} - 1, \\ &= \epsilon_{33} + [\epsilon_{11} \cos^2\phi + \epsilon_{12} \text{sen}2\phi + \epsilon_{22} \text{sen}^2\phi - \epsilon_{33}] \text{sen}^2\psi. \end{aligned} \quad (\text{I.15})$$

$$\begin{aligned} a_2 &= 1/2 [\epsilon_{\phi\psi+} - \epsilon_{\phi\psi-}] = \frac{d_{\phi\psi+} - d_{\phi\psi-}}{2 d_0}, \\ &= [\epsilon_{13} \cos\phi + \epsilon_{23} \text{sen}\phi] \text{sen}|2\psi| \end{aligned} \quad (\text{I.16})$$

onde teremos relações lineares entre  $a_1$  e  $\text{sen}^2\psi$  e entre  $a_2$  e  $\text{sen}|2\psi|$ . Desta forma,  $\epsilon_{33}$  é determinado para  $\psi=0$  na curva de  $a_1$  x  $\text{sen}^2\psi$ . Os outros componentes dos tensores  $\epsilon_{11}$ ,  $\epsilon_{12}$  e  $\epsilon_{22}$  podem ser

avaliados pela declividade  $\partial a_1 / \partial \text{sen}^2 \psi$ , da seguinte forma :

- i) para  $\phi = 0$  determinamos  $\epsilon_{11} - \epsilon_{33}$ , e portanto  $\epsilon_{11}$ .
- ii) para  $\phi = 90$  determinamos  $\epsilon_{22} - \epsilon_{33}$  e daí  $\epsilon_{22}$
- iii) para  $\phi = 45$  obtemos o valor de  $\epsilon_{12}$ .

Pelo declive  $\partial a_2 / \partial (\text{sen} |2\psi|)$ ,  $\epsilon_{13}$  pode ser determinado para  $\phi=0$  e  $\epsilon_{23}$  para  $\phi = 90$ .

Uma vez que as medidas por difração de raios-X são seletivas, a anisotropia deve ser considerada, e portanto, as componentes de tensão devem ser calculadas por<sup>(6)</sup>:

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{1/2 s_2(hkl)} [\epsilon_{ij} - \delta_{ij} \frac{s_1(hkl)}{1/2 s_2(hkl) + 3 s_1(hkl)} (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33})] \quad (\text{I.17})$$

onde  $s_1(hkl)$  e  $1/2 s_2(hkl)$  são as constantes elásticas isotrópicas de raios-X, que dependem diretamente do plano escolhido para a medida. Estas constantes são escritas algumas vezes, como:

$$s_1(hkl) = (-\nu/E)_{hkl}$$

$$\frac{1}{2} s_2(hkl) = (1+\nu/E)_{hkl}$$

onde o termo  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker.

#### I.4 - TENSÃO NORMAL

O método proposto em I.3, para solução do problema do  $\psi$  "splitting" é, frequentemente, utilizado para a avaliação da tensão residual em materiais. Porém, pelo fato das tensões de cisalhamento serem diferentes de zero surge a idéia do gradiente de tensão, já que na superfície, estas tensões deveriam ser necessariamente zero. Assim, o valor das tensões medidas devem ser valores médios dos tensores em cada camada infinitesimal  $dz$  até a profundidade máxima, denominada  $z_{\text{max}}$ , alcançada pela radiação X, de modo que:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{\int_0^{z_{max}} \sigma_{ij} e^{(-z/T)} dz}{\int_0^{z_{max}} e^{(-z/T)} dz} \quad (I.18)$$

onde

$$T = \frac{\text{sen}^2 \theta - \text{sen}^2 \psi}{2\mu \text{sen} \theta \cos \psi}$$

com:  $\theta$  = ângulo de Bragg

$\mu$  = coeficiente de absorção

$\psi$  = ângulo de inclinação do feixe em relação à normal à superfície da amostra

Vários autores<sup>(5,16,17)</sup> propõem métodos numéricos baseados fundamentalmente nas seguintes hipóteses: i) o gradiente de tensão tem uma relação linear com a profundidade alcançada pelos raios-X, ii) a penetração dos raios-X é função de  $\text{sen}^2 \psi$  e iii) a deformação medida é a média ponderada da deformação pela intensidade em cada camada. Fundamentalmente, o gradiente de tensão causa uma curvatura no gráfico de  $d \times \text{sen}^2 \psi$ .

## 1.5 - TEXTURA

### 1.5.1 - Influência nas Constantes Elásticas

Um dos principais efeitos negativos para a precisão de medidas de tensão residual é a presença de orientação cristalográfica preferencial. Vários autores<sup>(3,7,14,18,19)</sup> observaram que quando um material possui textura, a curva  $d \times \text{sen}^2 \psi$ , apresenta não-linearidade, o que contraria a teoria baseada na isotropia.

Marion e Cohen<sup>(7)</sup> apresentaram considerações baseadas na proposição de Weitemann, na tentativa de quantificar o efeito da textura, utilizando métodos diretos por meio de figuras de polo.

Propuseram uma função de correção  $f(\psi, \phi)$ , de modo que a equação básica para determinação da tensão residual torna-se:

$$d_{\psi\phi} = (d_{\max} - d_B) f(\psi, \phi) + d_{\perp} \left( \frac{1+\nu}{E} \right) \sigma_{\phi} \sin\psi + d_B \quad (\text{I.19})$$

onde  $f(\psi, \phi)$  intensidade do plano cristalográfico normalizada

$d_{\perp}$  é medido em  $\psi = 0$

$d_{\max}$  máximo valor da distância interplanar

$d_B$  distância interplanar para a região B<sup>(7)</sup>

Este tratamento, porém, não abordava completamente o problema, pois além de não corrigir inteiramente a não linearidade, não explicava a causa deste efeito. Mais tarde, em 1980, Dolle<sup>(9)</sup> e Dolle e Cohen<sup>(10)</sup> sugeriram um tratamento mais geral, que relacionava a deformação da rede com as constantes elásticas e os ângulos  $\phi$  e  $\psi$ . Este método, mais tarde desenvolvido por Brakmann<sup>(11,20)</sup>, mostrou-se ser o mais correto do ponto de vista científico. Todos estes autores sugerem que as oscilações se devem à anisotropia das constantes elásticas, que variam de acordo com o ângulo  $\phi$  e  $\psi$  em materiais texturados, uma vez que grãos com diferentes orientações são examinados para cada  $\phi$  e  $\psi$ . A crítica a esta idéia está no fato de que para materiais sem textura a medida é também seletiva, e apesar disto, a linearidade se verifica.

O fato correto é que o problema ocorre, não em função da anisotropia das constantes elásticas, mas sim, em função da relação de orientação entre os tensores de tensão e a orientação cristalográfica, o que faz com que um monocristal sujeito à mesma tensão, mas em direções cristalinas diferentes, sofra deformações diferentes na direção de aplicação da tensão. Portanto se queremos calcular a deformação sofrida por um material numa dada direção  $\psi$  e  $\phi$ , é necessário somar todas as deformações sofridas por todos os "monocristais" em posição de Bragg.

A Figura I.4 mostra como esta soma deve ser feita. Na direção 1 temos um vetor  $[hkl]$  em posição de Bragg com o feixe

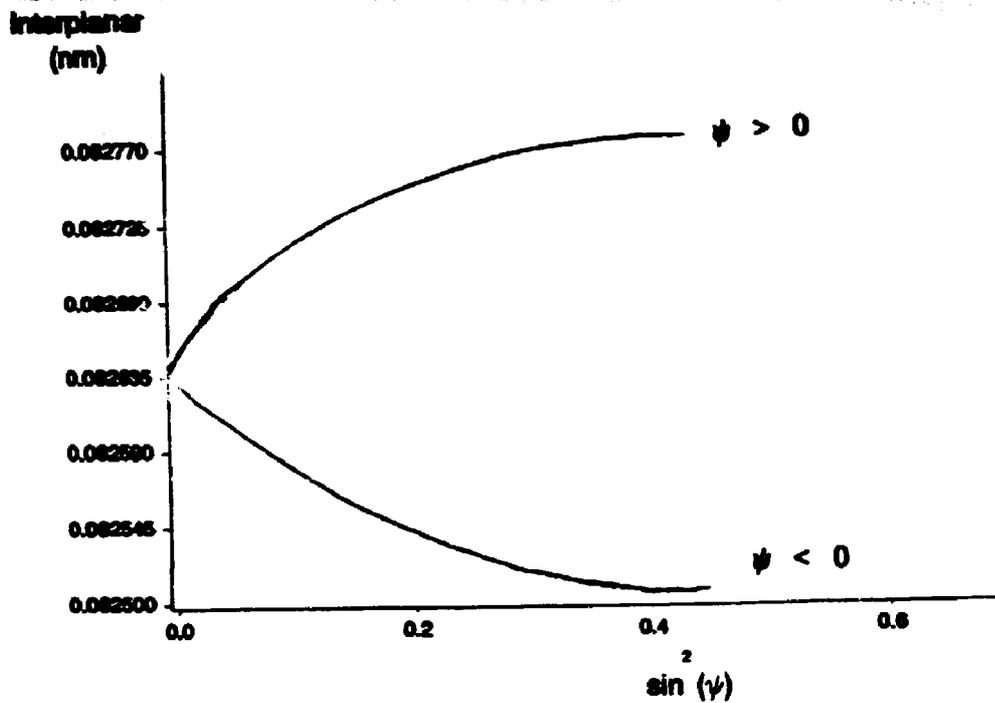


FIGURA I.3 - Efeito das tensões de cisalhamento  $\sigma_{13}$  e  $\sigma_{23}$ .

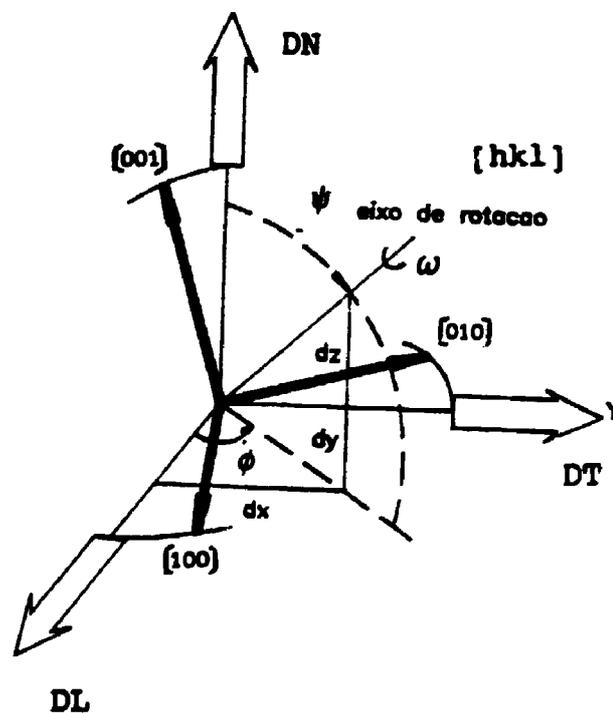


FIGURA I.4 - Sistema de coordenadas do cristal em relação ao sistema da amostra. O vetor  $[hkl]$  é paralelo ao vetor  $L_3$  do sistema de coordenadas do laboratório.

incidente. Se tomarmos a rotação  $\omega$  em torno deste eixo, teremos várias orientações dos vetores primitivos [100], [010] e [001] em relação à direção de laminação (eixo  $P_1$ ), direção transversal (eixo  $P_2$ ) e direção normal (eixo  $P_3$ ) da amostra. Cada  $\omega$  determina as diferentes orientações do cristal em relação às tensões aplicadas  $\sigma_{ij}$ , já que com o cristal sofrendo deformações diferentes, torna-se necessário o conhecimento da distribuição de orientação, isto é, a quantidade de grãos com uma determinada orientação, para que se possa avaliar a deformação sofrida por cada orientação. Assim, torna-se possível estimar a deformação final, segundo a equação:

$$\langle \epsilon(\phi, \psi) \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} f(g) \epsilon'_{33}(\phi, \psi)_{hkl} d\omega}{\int_0^{2\pi} f(g) d\omega} \quad (I.20)$$

sendo  $f(g)$  a função distribuição de orientação e onde  $\epsilon'_{33}(\phi, \psi)$  relaciona-se com o tensor de tensão da seguinte forma:

$$\epsilon'_{33} = s'_{33ij} \sigma'_{ij} \quad (I.21)$$

onde  $s'_{33ij} = \gamma_{3m} \gamma_{3n} \gamma_{1o} \gamma_{jp} \tilde{s}_{mnop}$  e  $s'_{33ij} = s'_{33ji}$  (I.22)

sendo  $\tilde{s}_{mnop}$  a compliança do monocristal em relação aos eixos (001), (010) e (001),  $\gamma_{ixj}$  os cossenos diretores entre o sistema do cristal e o sistema do laboratório, expresso em coordenadas do cristal. Estes cossenos diretores, para a direção 3, são dados por<sup>(9,10)</sup>:

$$\begin{aligned} \gamma_{31} &= h / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \\ \gamma_{32} &= k / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \\ \gamma_{33} &= l / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (I.23)$$

Os cossenos diretores para a direção 2, são:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \\ \gamma_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\phi & \text{sen}\phi & 0 \\ -\text{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{21} \\ \beta_{22} \\ \beta_{23} \end{bmatrix} \quad (\text{I.24})$$

onde  $\beta_{21}$  é o vetor unitário na direção transversal da amostra nas coordenadas do cristal, e finalmente, para a direção 1:

$$\gamma_{11} = \gamma_{21} \times \gamma_{31} \quad (\text{I.25})$$

Aplicando as definições acima na equação (I.22), teremos:

$$\begin{aligned} s'_{3311} &= \bar{s}_{1122} + \bar{s}_0 \gamma_{1k}^2 \gamma_{3k}^2 \\ s'_{3322} &= \bar{s}_{1122} + \bar{s}_0 \gamma_{2k}^2 \gamma_{3k}^2 \\ s'_{3333} &= \bar{s}_{1122} + 2 \bar{s}_{1212} + \bar{s}_0 \gamma_{3k}^4 \\ s'_{3312} &= \bar{s}_0 \gamma_{1k} \gamma_{2k} \gamma_{3k}^2 \\ s'_{3313} &= \bar{s}_0 \gamma_{1k} \gamma_{3k}^3 \\ s'_{3323} &= \bar{s}_0 \gamma_{2k} \gamma_{3k}^3 \end{aligned} \quad (\text{I.26})$$

Usando as relações (I.26) nas equações (I.1) e (I.9), obtemos:

$$\begin{aligned}
(d_{\phi\psi} - d_0)/d_0 = c'_{33} = & [S'_{11} \cos^2 \phi \cos^2 \psi + S'_{22} \sin^2 \phi + S'_{33} \cos^2 \phi \sin^2 \psi \\
& - S'_{12} \sin 2\phi \cos \psi + S'_{13} \cos^2 \phi \sin 2\psi - S'_{23} \sin 2\phi \sin \psi] \sigma_{11} \\
& + [S'_{11} \sin^2 \phi \cos^2 \psi + S'_{22} \cos^2 \phi + S'_{33} \sin^2 \phi \sin^2 \psi \\
& + S'_{12} \sin 2\phi \cos \psi + S'_{13} \sin^2 \phi \sin 2\psi + S'_{23} \sin 2\phi \sin \psi] \sigma_{22} \\
& + [S'_{11} \sin 2\phi \cos^2 \psi - S'_{22} \sin 2\phi + S'_{33} \sin 2\phi \sin^2 \psi \\
& + 2S'_{12} \cos 2\phi \cos \psi + S'_{13} \sin 2\phi \sin 2\psi + 2S'_{23} \cos 2\phi \sin \psi] \sigma_{12} \\
& + [S'_{11} \sin^2 \psi + S'_{33} \cos^2 \psi - S'_{13} \sin 2\psi] \sigma_{33} \\
& + [-S'_{11} \cos \phi \sin 2\psi + S'_{33} \cos \phi \sin 2\psi + 2S'_{12} \sin \phi \sin \psi \\
& + 2S'_{13} \cos \phi \cos 2\psi - 2S'_{23} \sin \phi \cos \psi] \sigma_{13} \\
& + [-S'_{11} \sin \phi \sin 2\psi + S'_{33} \sin \phi \sin 2\psi - 2S'_{12} \cos \phi \sin \psi \\
& + 2S'_{13} \sin \phi \cos 2\psi + 2S'_{23} \cos \phi \cos \psi] \sigma_{23} \\
= & F_{ij}(\phi, \psi, S'_{ij}) \sigma_{ij} \tag{I.27}
\end{aligned}$$

onde  $S'_{ij} = s'_{33ij}$ .

Para materiais policristalinos e isotrópicos,  $f(g)$  é constante, assim a equação (I.20), torna-se:

$$\langle \epsilon_{33}(\phi\psi) \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} c'_{33}(\phi, \psi) d\omega}{\int_0^{2\pi} d\omega}$$

deformação que é obtida pela relação linear entre  $d$  e  $\sin^2 \psi$ , na qual se utiliza as constantes elásticas de raios-X.

Analisando as expressões para transformação das componentes do tensor do sistema monocristalino para o sistema do laboratório (equação I.25), temos que:

$$\gamma_{ik} \gamma_{jk} = \delta_{ij}$$

para reflexões do tipo (h00) e (hhh), e portanto, é esperado que para  $i=j$ ,  $s'_{33ij}$  seja constante para qualquer sistema de medida e que para  $i \neq j$ ,  $s'_{33ij}$  seja igual a zero, o que resulta na teoria

isotrópica para medidas de tensão residual.

### I.5.2 - TEXTURA - MÉTODO ANALÍTICO

Para se descrever a orientação dos cristais em uma chapa laminada de um material policristalino, primeiramente define-se um sistema de coordenadas ortogonais  $P_1$ , (conforme Figura I.5), que represente a amostra a ser investigada. Depois, para cada cristal é escolhido um outro sistema de coordenadas ortogonais  $C_1$ , coincidentes com os eixos da rede cristalina. As orientações dos cristalitos no policristal são descritas especificando-se as rotações  $g$ , que os eixos ortogonais do sistema cristalino devem sofrer, para que sejam coincidentes com o sistema da amostra. Portanto  $f(g)$  descreve a quantidade de células unitárias que devem sofrer uma rotação  $g$  para que o sistema de coordenadas  $C_1$  coincida com o sistema  $P_1$ .

As rotações "g" são melhores descritas em função dos ângulos de Euler ( $\varphi_1, \theta, \varphi_2$ ), a Figura I.5 representa essas rotações.

A função  $f(g)$ , ou seja, a função de distribuição de orientações (FDO), é definida da seguinte forma<sup>(12)</sup>:

$$dV/V = f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) d\varphi_1 d\varphi_2 d\theta / 8\pi^2 = f(g) \quad (I.28)$$

onde  $dV/V$  representa a fração volumétrica de grãos que possuem orientação  $g$  no intervalo  $d\varphi_1 d\varphi_2 d\theta$ . A constante  $8\pi^2$  é o fator de normalização, o que torna a soma de todas as orientações igual a unidade<sup>(18)</sup>.

A função de distribuição de orientações, que possui ou não propriedades de simetria, pode ser desenvolvida em série de funções harmônicas esféricas  $T_1^{mn}$ <sup>(12)</sup>, ou seja:

$$f(g) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l C_l^{mn} T_1^{mn}(g) \quad (I.29)$$

Escrevendo  $f(g)$  em função dos ângulos de Euler, temos:

$$f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l C_l^m \exp(in\varphi_1) P_l^m \exp(-in\varphi_2) \quad (I.30)$$

onde  $P_l^m$  são os Polinômios Associados de Legendre.

Uma vez que  $f(g)$  deve ser uma quantidade real, temos que  $f(g) = f^*(g)$ , portanto  $C_l^m = (-1)^{m*} C_l^{m*}$ . Além disto, se  $f(g.g_0) = f(g)$ , dizemos então, que  $f(g)$  é invariante sob uma rotação  $g_0$  e o grupo de rotações que a torna invariante é chamado grupo  $G_0$ , o qual define as simetrias tanto da amostra quanto do cristal. Portanto, a equação pode ser escrita como:

$$f(g) = \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(1)} \sum_{\nu=1}^{N(1)} C_l^{\mu\nu} T_l^{\mu\nu}(g) \quad (I.31)$$

onde os símbolos "N" e "N" significam as simetrias do cristal e da amostra, respectivamente, e onde

$$T_l^{\mu\nu} = \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l \dot{A}_l^{m\mu} \dot{A}_l^{n\nu} T_l^m(g) \quad (I.32)$$

sendo, portanto,  $\dot{A}_l^{m\mu}$  e  $\dot{A}_l^{n\nu}$  coeficientes de simetria do cristal e da amostra.

Para o caso específico de uma amostra laminada, simetria ortorrômbica, formada por cristais de simetria cúbica, estes coeficientes são dados por:

$$a) \text{ para simetria ortorrômbica } \dot{A}_l^{n\nu} = \begin{cases} 1, & \text{para } \nu=1 \text{ e } n=0 \\ \delta_{\nu n}, & \text{para } n = |2\nu-2| \end{cases} \quad (I.33)$$

onde  $\nu$  e  $n$  são números inteiros e  $1 \leq \nu \leq N(1)$ ;

b) para a simetria cúbica devemos resolver o sistema de equações lineares:

$$\sum_{m=-1}^1 A_1^{m\mu} a_1^{m\mu} = 0 \quad (\text{I.34})$$

onde  $m = 4m'$ ,  $s = 4s' + 2$ ,  $1 \leq \mu \leq M(1)$ , sendo  $m'$  e  $s'$  inteiros.

O número máximo de funções harmônicas esféricas linearmente independentes em função do grau  $l$  e da simetria, é apresentado na Figura I.6.

Uma vez conhecidos os coeficientes de simetria  $A_1^{\nu n}$  e  $A_1^{\mu m}$ , além dos valores dos polinômios associados de Legendre  $P_1^m$ , é necessário conhecer os coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ , que são característicos da textura de cada amostra e devem ser obtidos experimentalmente. Isto é feito através de um tratamento matemático dos dados obtidos por figuras de polo.

A figura de polo direta é representada por projeções estereográficas da distribuição espacial das normais a certas famílias de planos  $(hkl)$ , de cada valor desta projeção representa a densidade de planos  $(hkl)$ , tomando como unidade de medida a densidade de planos de uma amostra com grãos orientados ao acaso. A projeção é baseada em um sistema de coordenadas referente a amostra  $P_1$ , conforme definição anterior.

Para se levantar a figura de polo existem basicamente dois métodos: transmissão e reflexão. Estes métodos, se convenientemente trabalhados, fornecem a figura de polo completa. Pode-se também obter figuras de polo completas quando se utiliza amostras compostas<sup>(22,23)</sup>.

Todos estes métodos de obtenção de figuras de polo completas possuem suas limitações. Pelo método de transmissão, a amostra deve possuir uma espessura tal que permita que o feixe difratado a atravesse. Na amostra composta o fator limitante é a quantidade de amostra necessária e a precisão do ângulo de corte.

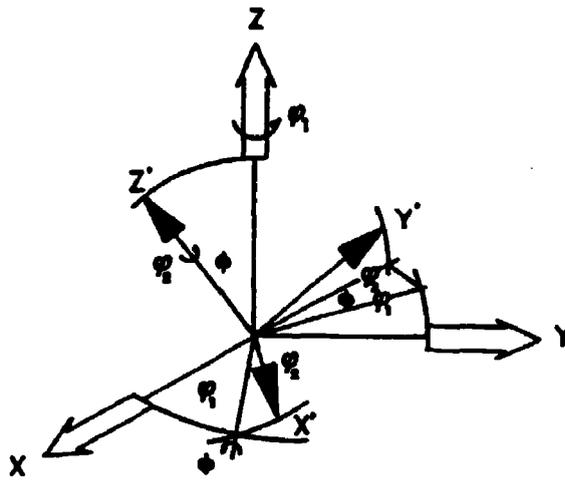


FIGURA I.5 - Definição dos ângulos de Euler.

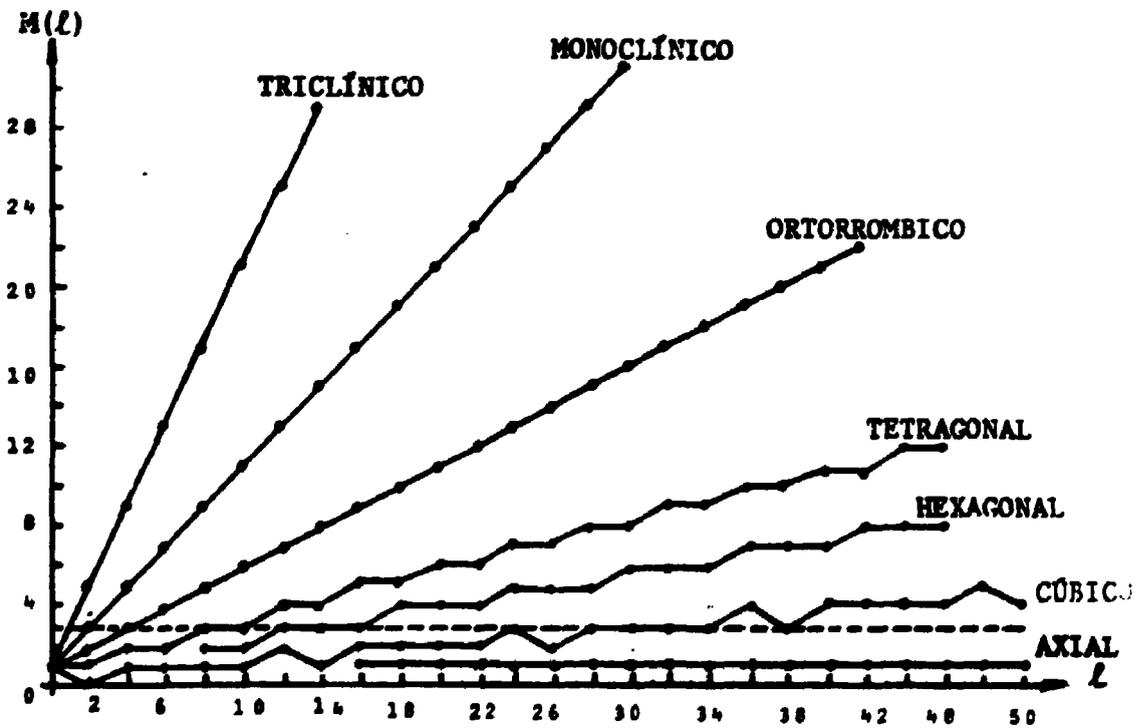


FIGURA I.6 - Número de harmônicas esféricas simétricas linearmente independentes em função do grau l.

Bunge<sup>(12,14)</sup> desenvolveu um método matemático para o levantamento de figuras de polo completas utilizando somente o método da reflexão. Uma vez que a distribuição de orientações dos cristalitos, pode ser descrita por meio de uma expansão em série, cada figura de polo  $P(h_1, \gamma)$  pode ser expandida em uma série de harmônicos esféricos simétricos ( $K_1^{\circ\mu}$  e  $K_1^{\nu}$ ) do tipo:

$$P(h_1, \gamma) = \sum_{l=0}^L \sum_{\nu=1}^{N(l)} \left\{ 4\pi / (2l+1) \sum_{\mu=1}^{N(l)} C_1^{\mu\nu} K_1^{\circ\mu}(h_1) \right\} \cdot K_1^{\nu}(\gamma) \quad (I.35)$$

onde  $h_1 = (hkl)_1$  representam os índices de Miller do plano cristalográfico escolhido,  $\gamma$  representa o sistema de coordenadas da amostra,  $(\alpha, \beta)$  e  $C_1^{\mu\nu}$  são os coeficientes que devem ser calculados.

A partir dos dados das figuras de polo completas, os coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  são facilmente obtidos uma vez que se utiliza as propriedades de ortogonalidade dos harmônicos esféricos de superfície simétricos. O uso das figuras de polo incompletas resulta na impossibilidade da utilização das propriedades de ortogonalidade das funções harmônicas, uma vez que estas propriedades dependem da faixa de integração, e portanto, estas integrais devem ser avaliadas explicitamente por métodos numéricos.

O método proposto por Bunge baseia-se na seguinte hipótese:

$$\sum_i \int_B [ Ph_i(\gamma)_{\text{observado}} - Ph_i(\gamma)_{\text{calculado}} ]^2 dy = \min \quad (I.36)$$

onde:  $i$  = número de figuras de polos incompletas

$B$  = região analisada  $\left[ \begin{array}{l} 0 \leq \alpha \leq \alpha_{\text{max}} \\ 0 \leq \beta \leq \pi/2 \end{array} \right.$

Unindo-se I.35 e I.36, e introduzindo o fator de normalização  $N_1$  temos:

$$\sum_{i=1}^L \int_B [ N_i \hat{P}h(y)_{obs} - \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} 4\pi/(2l+1) C_1^{\mu\nu} \dot{K}_1^{\circ\mu} \dot{K}_1^{\nu} ] dy = \min \quad (I.37)$$

onde

$$N_i \hat{P}h_i(y)_{obs} = Ph_i(y)_{obs} \quad (I.38)$$

O fator  $N_i$  é obtido por meio da figura de polo completa utilizando a equação:

$$N_i = 1/(2\pi) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} Ph_i(y) dy. \quad (I.39)$$

Para amostras que possuem simetrias cristalinas cúbicas, podemos fazer a seguinte aproximação<sup>(23)</sup>,

$$N_i = \frac{\int_B Ph_i(y) dy}{\int_B dy} \quad (I.40)$$

Voltando à equação I.37 e derivando em relação a  $C_1^{\mu\nu}$ , teremos:

$$\sum_{i=1}^L \int_B \dot{K}_1^{\circ\mu}(h_i) \dot{K}_1^{\nu}(y) [ N_i \hat{P}h_i(y)_{obs} - \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} 4\pi/(2l+1) C_1^{\mu\nu} \dot{K}_1^{\circ\mu}(h_i) \times \dot{K}_1^{\nu}(y) ] dy = 0. \quad (I.41)$$

Diferenciando, agora, em relação a  $N_i$ , obtemos:

$$\int_B Ph_i(y)_{obs} [ N_i \hat{P}h_i(y)_{obs} - \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} 4\pi/(2l+1) C_1^{\mu\nu} \dot{K}_1^{\circ\mu}(h_i) \dot{K}_1^{\nu}(y) ] dy = 0 \quad (I.42)$$

Se introduzirmos as seguintes variáveis:

$$\dot{K}_1^{\circ\mu}(h_1) \int_B \hat{P}(h_1) \dot{K}_1^{\nu}(y) dy = A_1^{\mu\nu}(h_1), \quad (I.43)$$

$$\int_B \dot{K}_1^{\nu}(y) \dot{K}_1^{\nu'}(y) dy = \xi_{11}^{\nu\nu'}, \quad (I.44)$$

$$\sum_1 4\pi/(2l+1) \dot{K}_1^{\circ\mu}(h_1) \dot{K}_1^{\circ\mu'}(h_1) = \alpha_{11}^{\mu\mu'}, \quad (I.45)$$

a equação torna-se:

$$\sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(1)} \sum_{\nu=1}^{N(1)} C_1^{\mu\nu} \alpha_{11}^{\mu\mu'} \xi_{11}^{\nu\nu'} = \sum_1 N_1 A_1^{\mu'\nu'}(h_1) \quad (I.46)$$

$$\sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(1)} \sum_{\nu=1}^{N(1)} C_1^{\mu\nu} 4\pi/(2l+1) A_1^{\mu\nu}(h_1) = N_1 P_1 \quad (I.47)$$

Expressando-se o fator de normalização segundo a equação I.47, e substituindo-o na equação I.46, teremos:

$$\sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(1)} \sum_{\nu=1}^{N(1)} C_1^{\mu\nu} [\alpha_{11}^{\mu\mu'} \xi_{11}^{\nu\nu'} - 4\pi/(2l+1) \sum_1 A_1^{\mu\nu}(h_1) A_1^{\mu'\nu'}(h_1)/P_1] = 0 \quad (I.48)$$

A variável  $\xi_{11}^{\nu\nu'}$  ainda mantém as relações de ortogonalidade entre as funções dependentes do ângulo  $\beta$ . Para o caso específico onde as amostras possuem simetria ortorrômbica, os harmônicos esféricos de superfície simétricos, tornam-se:

$$\dot{K}_1^{\nu}(y) = c^{\nu}/(\text{sqr}(2\pi)) \bar{P}_1^2(\frac{\nu-1}{\cos\alpha}) \cdot \cos[(2\nu-1)\beta] \quad (I.49)$$

onde  $P_1^{\mu} \cos \alpha$  são os polinômios associados de Legendre e:

$$c^{\nu} = \begin{cases} 1 & \text{para } \nu=1 \\ \text{sqr}(2) & \text{para } \nu \neq 1 \end{cases}$$

$$\xi_{11}^{\nu\nu'} = \xi_{11}^{\nu} \delta_{\nu\nu'}$$

com

$$\xi_{11}^{\nu} = \int_{\phi_a}^{\phi_b} \overline{P}_1^{2(\nu-1)}(\cos\alpha) P_1^{2(\nu-1)}(\cos\alpha) \text{ sen}\alpha \, d\alpha$$

Portanto, a equação pode ser escrita, como:

$$\sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_1^{\mu\nu} [\alpha_{11}^{\mu\mu'}, \xi_{11}^{\nu} - 4\pi/(2l+1) \sum_1 A_1^{\mu\nu}(h_1) A_1^{\mu'\nu'}(h_1)/P_1] = 0 \quad (\text{I.50})$$

que é válida somente para amostras com simetria ortorrômbica, cujos cristais apresentam simetria cúbica.

### I.5.3 - Otimização das Variáveis

O sistema de equações lineares obtido através da equação I.50, possui o número de equações igual ao número de coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  desconhecidos, que é limitado por um valor máximo L na expansão em série. Uma vez que este é um sistema linear e homogêneo, pode ser resolvido até o fator comum  $C_0^{11}=1$ , que é uma imposição de normalização tanto da função de distribuição de orientações quanto da figura de polo. Truncando a série em  $l=22$  temos, então, uma matriz de  $124 \times 124$ , da qual calculamos os valores dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ .

Na Figura I.6 é apresentada a variação de  $\mu$  e  $\nu$  em função do valor de  $l$  e da simetria utilizada. A Figura I.7 apresenta o erro relativo cometido no cálculo dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  em função do número de figuras de polos e do ângulo máximo de inclinação  $\alpha_{\text{max}}$  segundo *Porpiech e Jura*<sup>(12)</sup>.

Neste trabalho foi utilizado somente o método da reflexão de *Schulz*, que é o mais conveniente para amostras planas. Neste método, pela correta escolha das fendas, é possível obter figuras de polo sem correção para absorção até aproximadamente  $\alpha=70^\circ$ . Para sua correta utilização, é necessário um suporte para amostras com

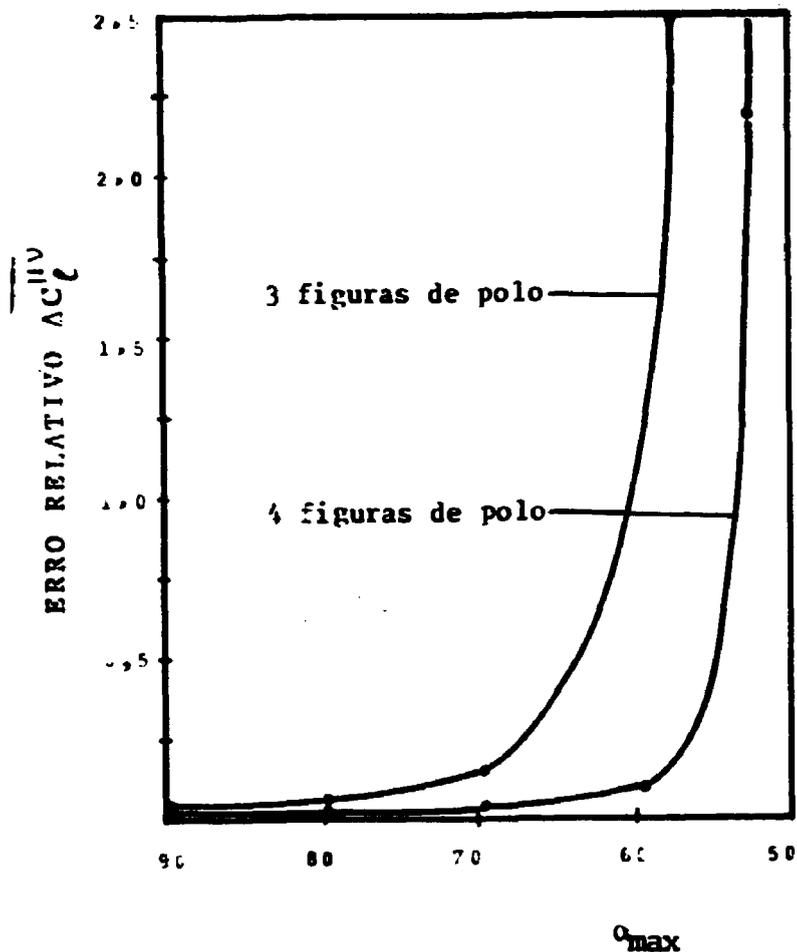


FIGURA I.7 - Desvio quadrático médio do coeficiente  $C_1^{\mu\nu}$  obtido por figuras de polo incompletas.

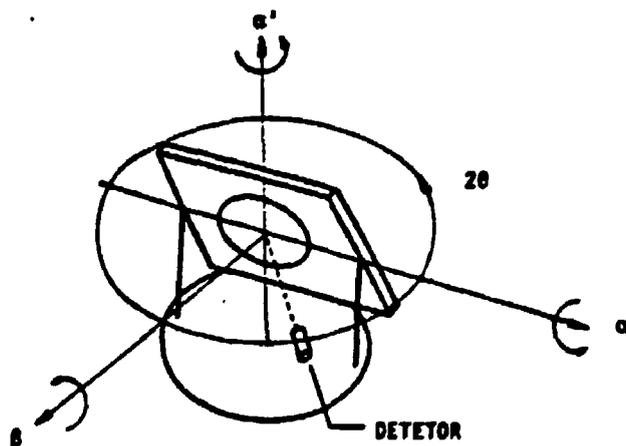


FIGURA I.8 - Geometria do goniômetro de textura. O eixo  $\beta$  é perpendicular à superfície da amostra e os eixos  $\alpha$  e  $\alpha'$  são perpendiculares a  $\beta$ . No caso de transmissão, fixa-se  $\alpha=0$  e gira-se em torno de  $\alpha'$ . No caso de reflexão, fixa-se  $\alpha'=0$  e gira-se de  $\alpha$ .

dois eixos, acoplado a um difratômetro, que possui dois giros  $\theta$  e  $2\theta$ . Todo este conjunto possui, portanto, 4 eixos, conforme Figura I.8. Este método é o mais difundido para medidas de textura.

As figuras de polo, obtidas neste trabalho, são figuras de polo incompletas, que fornecem dados, dos quais se obtém os valores dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  e, a partir daí, a função de distribuição de orientações e a figura de polo completa (equação I.35).

As aplicações práticas dos métodos descritos anteriormente necessitam de cálculos somente possíveis em computador de grande capacidade de memória. Para isso foi desenvolvido um programa em linguagem FORTRAN, que tem como entrada de dados as figuras de polo normalizadas, e já corrigidas, dos efeitos de ruído e defocalização do feixe e como saída, os coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ , as figuras de polo completas, a função de distribuição de orientações e  $\langle \epsilon_{\phi, \psi} \rangle$ . Na Figura I.9 está apresentada uma estrutura geral deste sistema, para a qual foram desenvolvidos cinco programas distintos:

#### 1) Programa BIBLIOTECA

Este programa calcula funções e coeficientes puramente matemáticos, independente dos valores experimentais. Os valores armazenados são:

- os polinômios associados de Legendre  $P_1^m(\cos \alpha)$  e  $P_1^{ms}(\cos \alpha)$ , onde  $\alpha$  varia de  $0^\circ$  a  $90^\circ$  em passos de  $\Delta\alpha = 5^\circ$ ;
- os coeficientes de simetria  $A_1^{ms}$ ;
- as funções harmônicas esféricas simétricas de superfície  $K_1^m$ ;
- os coeficientes de Fourier  $a_1^{ms}$  e  $a_1^{ss}$ ;

Para os cálculos efetivos deve ser considerada a simetria cúbica do cristal e ortorrômbica da amostra. A expansão máxima da série é  $l_{\max} = 34$  com  $m$ ,  $n$  e  $s$  variando de 0 a 1 em passos  $\Delta m$ ,  $\Delta n$  e  $\Delta s$  iguais a 2. O índice  $\mu$  varia de 1 a  $M(1)$ , conforme pode ser

observado na Figura I.6, de acordo com a simetria.

## 2) Programa NELSON

A partir de quatro figuras de polo incompletas, utiliza-se as equações I.50, para  $l_{\max} = 22$ , de modo a criar um sistema de equações lineares com 124 equações e 124 incógnitas, a partir das quais calcula-se os valores dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ .

Para o cobre e o alumínio foram utilizadas as seguintes figuras de polo: (111), (200), (220) e (311), enquanto que, para as amostras de aço foram feitas as figuras: (200), (110), (112) e (310).

## 3) Programa CLMINI

A partir da equação I.35 foi desenvolvido um programa que calcula, teoricamente, as figuras de polo completa dos planos cristalográficos (100), (110), (111), (102), (112), (122), (103) e (113), a partir dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ , com passos de  $\Delta\alpha = \Delta\beta = 5^\circ$

## 4) Programa FDO

Este programa calcula a função de distribuição de orientações para as simetrias cúbica do cristal e ortorrômbica da amostra, a partir dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  em função dos ângulos de Euler. Os ângulos de Euler definem as rotações necessárias que sofrem um grupo de cristais com orientação  $g$ , para alinhar os eixos da célula primitiva com o sistema  $P_1$ .

## 5) Programa "EULER"

Este programa foi desenvolvido usando cálculo tensorial para avaliar as constantes elásticas em função de sua relação de orientação com a tensão aplicada e em função do plano cristalográfico. A partir daí, as deformações são calculadas

através da média ponderada das constantes elásticas resultantes, tendo como ponderador, a função distribuição de orientações.

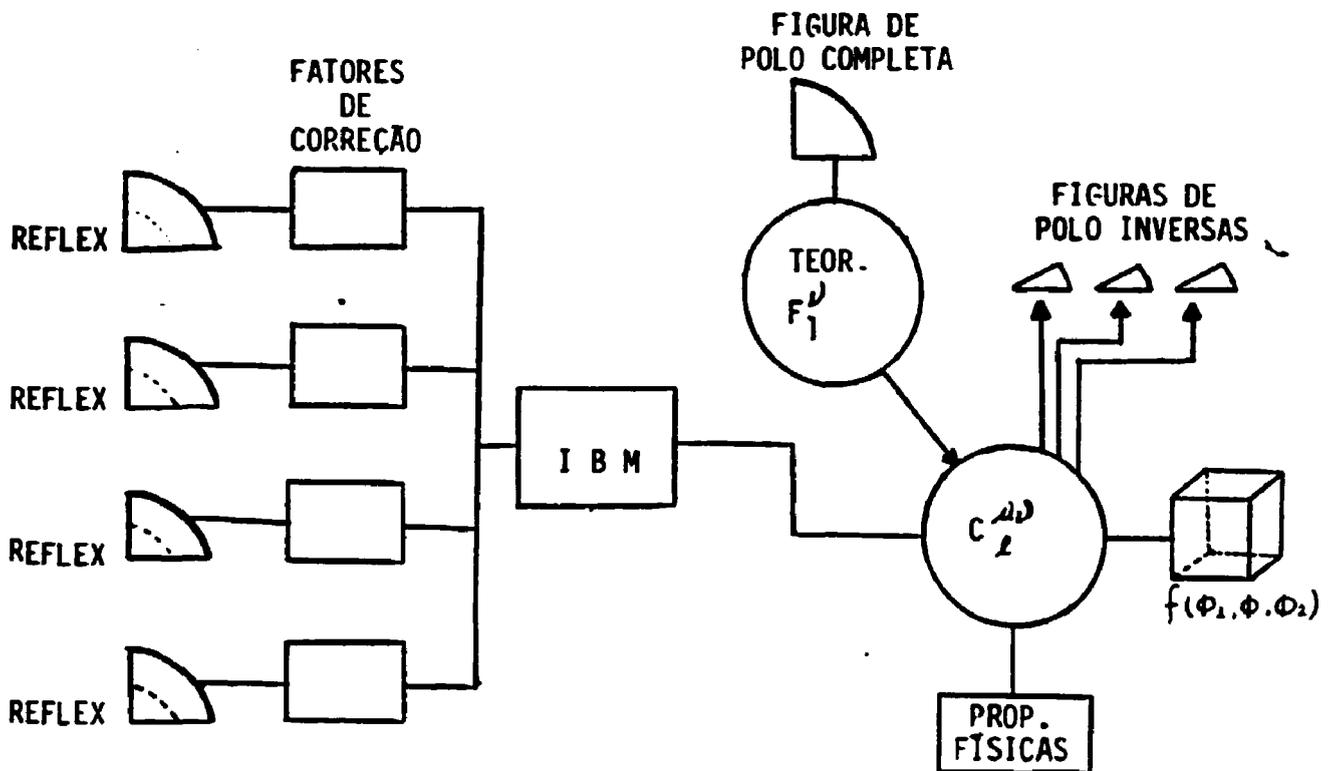


FIGURA I.9 - Estrutura geral de um sistema computacional para análise de textura.

#### I.5.4 - Texturas de Deformação

Deformações plásticas de materiais cristalinos ocorrem principalmente por processos de cisalhamento que são, geralmente, restritos a certos sistemas de escorregamento. A mudança na forma (conformação mecânica) é freqüentemente acompanhada por uma mudança na direção de orientação cristalográfica, que causa a chamada textura de deformação em materiais policristalinos. Teorias exatas do desenvolvimento da textura na deformação são difíceis de formular pela complexidade da plasticidade em

policristais. Entretanto, aproximações razoáveis correspondendo aos limites superior e inferior foram obtidos por Taylor<sup>(25)</sup> e por Sachs<sup>(25)</sup>.

O primeiro modelo para deformação plástica foi proposto por Sachs, o qual sugere que cada grão no material policristalino deforma-se como se fossem monocristais livres. A falha neste modelo é que uma vez que não existem vazios em materiais deformados plasticamente, excluindo aqueles por fratura, a continuidade da deformação deve ser mantida. Esta necessidade foi sanada na teoria de Taylor<sup>(24)</sup>, a qual sugere que todos os grãos no material policristalino sofrem a mesma deformação homoganeamente. O escorregamento homogêneo na teoria de Taylor requer simultâneos deslizamentos em, no mínimo, cinco sistemas diferentes, de modo que a energia seja mínima. Apesar disso, a teoria de Taylor viola a condição da continuidade de tensão nos contornos de grão, embora seja menos grave que a incompatibilidade na deformação apresentada no modelo de Sachs.

Leffers<sup>(26)</sup> introduziu o modelo de Sachs modificado, entretanto, o tratamento matemático dos dados tornou-se complexo.

Uma modificação, no modelo de Taylor levou ao modelo do "Relaxed Constraint", "RC",<sup>(24,25,27,28)</sup>, que considera uma deformação plástica heterogênea entre os grãos para satisfazer a necessidade da continuidade entre eles. O modelo de Taylor modificado prevê resultados muito bons para textura de chapas laminadas de materiais cfc com altos graus de deformação e com valores de EFE (energia de falha de empilhamento) variando do médio para alto.

Alam et al.<sup>(29)</sup> estudaram a textura de transição do tipo cobre para o tipo latão em função do conteúdo de zinco e da temperatura de laminação, pela variação da intensidade dos polos na figura de polo, tentando correlacionar os parâmetros de textura de transição com a energia de falha de empilhamento.

Hu e Goodman<sup>(30)</sup>, em 1964, deu a melhor idéia quantitativa, ainda que aproximada, para descrever a transição, integrando a densidade de polos em certas áreas das figuras de polo, obtendo a fração volumétrica aproximada das componentes de textura.

Greven e Wasserman<sup>(31)</sup> tentaram levar em conta, não somente as orientações ideais  $\{112\}\langle 111\rangle$ ,  $\{011\}\langle 211\rangle$ , mas também o espalhamento em torno destas orientações, levantando figuras de polo de cobre e alumínio laminados. Estes polos seriam obtidos por rotações de  $\pm 30^\circ$  em torno de certos polos  $\{111\}$  das duas componentes ideais.

Dillamore<sup>(32)</sup>, tentou dar uma explicação física para a estabilidade das orientações típicas da textura de laminação, usando a teoria de Taylor, obtendo as orientações estáveis entre  $\{011\}\langle 211\rangle$  e  $\{4\ 4\ 11\}\langle 11\ 11\ 8\rangle$ , sendo esta última muito próxima de  $\{112\}\langle 111\rangle$ .

O tratamento dos dados experimentais de textura através da função de distribuição de orientações, "FDO", é muito melhor que por figuras de polo, pois permite uma avaliação quantitativa muito precisa das frações volumétricas das orientações preferenciais.

Bunge<sup>(12)</sup> concluiu a partir da FDO, que a textura de cobre laminado apresenta um tubo de orientação com uma linha "esqueleto" de mesma intensidade que vai desde a orientação  $\{112\}\langle 111\rangle$ , passando pela orientação  $\{123\}\langle 634\rangle$  até a orientação  $\{011\}\langle 211\rangle$ . Além disso, concluíram que a transição para a textura do tipo latão ocorre com a redução no tamanho do tubo de orientações  $\{112\}\langle 111\rangle$  e que com aproximadamente 20% de zinco (alta EFE) apenas a orientação  $\{112\}\langle 111\rangle$  se mantém.

Hirsch e Lucke<sup>(28)</sup> estudaram o desenvolvimento da textura em cobre laminado e latão- $\alpha$  com valores para o teor de zinco de 2,5; 5; 10 e 30% em função do grau de redução. Utilizando

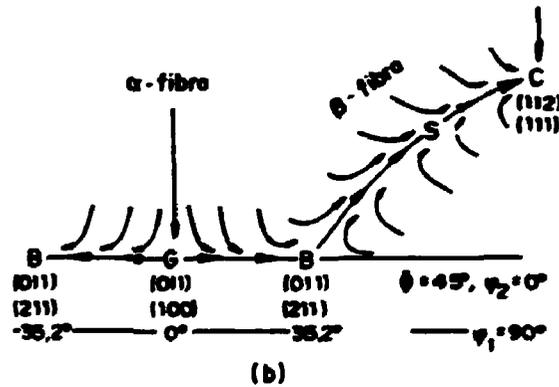
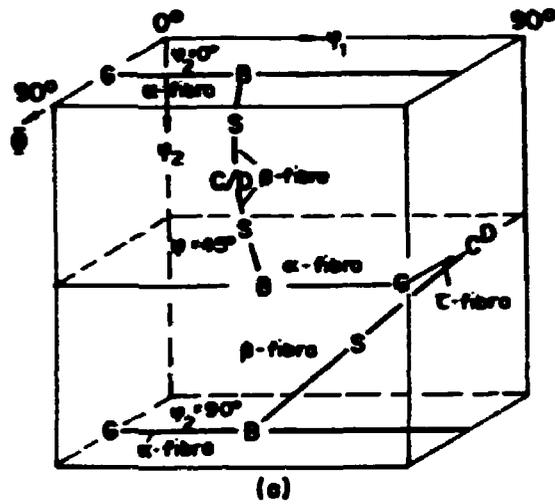


FIGURA I.10 - Gráfico das fibras de orientação da estrutura cfc.  
 (a) Espaço tridimensional de Euler mostrando a fibra  $\alpha$  ao longo da direção  $\langle 110 \rangle$  paralela a ND e a fibra  $\beta$  com a direção  $\langle 110 \rangle$  inclinada de  $60^\circ$  na direção de RD.  
 (b) Esquema das orientações importantes ao longo das fibras  $\alpha$  e  $\beta$ .

a função de distribuição de orientações, nestes casos, concluíram que a baixos graus de deformação todas as ligas investigadas possuíam texturas muito similares e descritas ao longo de duas fibras: a fibra  $\alpha$  ( $\langle 110 \rangle$  paralela à direção normal) e a fibra  $\beta$  ( $\langle 110 \rangle$  inclinado de  $60^\circ$  em relação à direção de laminação), (vide Figura I.10). Com o aumento do grau de laminação esta estrutura de fibra se deteriorava, e ao longo dessa estrutura, pronunciavam-se máximos, de modo que a orientação da fibra  $\beta$  se desdobrava originando máximos fora dessa linha. Plotando a fração volumétrica destes máximos em função do grau de redução é possível descrever o desenvolvimento da textura de laminação em metais cfc e verificar a influência da energia de falha de empilhamento para determinar os mecanismos da deformação.

Cuyás et al.<sup>(33)</sup> estudaram a não homogeneidade da textura de laminação do alumínio sob influência da fricção entre a amostra e o rolo do laminador, o que geraria o gradiente de textura.

Em linhas gerais, é freqüentemente aceito que materiais cfc com alta energia de falha de empilhamento, submetidos à deformação por laminação, desenvolvem com maior intensidade a textura tipo do Cu( $\{112\}\langle 111 \rangle$ ), enquanto que os mesmos materiais com baixas EFE, desenvolvem a textura do tipo latão ( $\{110\}\langle 112 \rangle$ ). Já os materiais cuja EFE tem valores intermediários apresentam textura mista (tipo Cobre e tipo latão), com intensidades de orientações proporcional ao valor da EFE, embora outras orientações de intensidades menores possam também estar presentes.

Para materiais ccc também são utilizados o modelo clássico de Taylor e o modelo do RC. Para estas estruturas existem algumas dificuldades adicionais em relação à estrutura cfc. Primeiramente, deve-se determinar os planos que contribuem para o deslizamento e de que forma se dá esta contribuição. Para a estrutura cfc existe uma concordância entre os pesquisadores, que o sistema  $\{111\}\langle 110 \rangle$  é o que, fundamentalmente, contribue para o deslizamento. Já para a estrutura ccc, a questão é bem mais

complexa. A direção de escorregamento é  $\langle 111 \rangle$ , mas os planos de deslizamento podem ser  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  e  $\{123\}$ . Em vista destas dificuldades, um modelo aproximado conhecido como "pencil glide", tem sido usado para prever a textura de deformação. Neste modelo é considerado possível o cisalhamento de todos os planos que contenham a direção  $\langle 111 \rangle$ . Tem sido mostrado que o uso dos planos  $\{110\}$  e  $\{211\}$  é suficiente para descrever, com razoável precisão, a deformação em materiais ccc.

As numerosas determinações de textura em materiais ccc laminados a frio, apresentam boa concordância quanto à determinação dos polos<sup>(3,12)</sup>. Fundamentalmente aço baixo carbono apresenta as orientações  $\{112\}\langle 110 \rangle$ ,  $\{011\}\langle 211 \rangle$  e  $\{100\}\langle 011 \rangle$ , e aços com alto teor de carbono apresentam as mesmas componentes de textura, embora menos pronunciadas.

Raphanel e Van Houtte<sup>(34)</sup>, simularam a textura de laminação em materiais ccc, por meio da teoria de Taylor. Os resultados quantitativos obtidos não foram muito satisfatórios em relação aos graus de orientação induzidos, embora tenham conseguido resultados muito positivos quanto ao tipo de orientação. As figuras de polo resultantes da simulação apresentam-se com polos muito mais intensos que os obtidos experimentalmente.

Bowkett e Harries<sup>(35)</sup>, em seu trabalho, sugerem que na transformação martensítica para aços do tipo 321, laminados a frio, a relação de orientação obedeça a relação de Nishiyama-Wasserman (N-W).

Ray et al.<sup>(36)</sup>, estudaram a correlação entre a textura da fase cfc e ccc, ocorrida na transformação  $\gamma \rightarrow \alpha'$ , na laminação de chapas de ligas Ni-Co com diferentes energias de falha de empilhamento. As maiores componentes de textura para a martensita derivada da austenita são  $\{332\}\langle 113 \rangle$  e  $\{311\}\langle 011 \rangle$ , originárias das componentes  $\{110\}\langle 112 \rangle$ ,  $\{112\}\langle 111 \rangle$ , respectivamente, e que

concordam com a relação de orientação prevista por Kurdjumov-Sachs (K-S).

As relações N-W e K-S para a transformação cfc/ccc são as seguintes:

Nishiyama-Wasserman

$$\begin{aligned}(111)_{\gamma} // (011)_{\alpha'} \\ \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle_{\gamma} // \langle 100 \rangle_{\alpha'} \\ \langle 11\bar{2} \rangle_{\gamma} // \langle 01\bar{1} \rangle_{\alpha'}\end{aligned}$$

Kurdjumov-Sachs

$$\begin{aligned}(111)_{\gamma} // (011)_{\alpha'} \\ \langle \bar{1}01 \rangle_{\gamma} // \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle_{\alpha'} \\ \langle \bar{1}\bar{2}\bar{1} \rangle_{\gamma} // \langle \bar{2}1\bar{1} \rangle_{\alpha'}\end{aligned}$$

#### I.6 - TRANSFORMAÇÃO DE FASE $\gamma \longrightarrow \alpha'$

A transformação em  $\alpha'$  ou  $\epsilon$  da fase  $\gamma$  por deformação plástica depende fundamentalmente, da energia de falha de empilhamento, "EFE", e do grau de deformação. A energia de falha de empilhamento da austenita em ligas de Fe-Cr-Ni, depende de sua composição e varia de 10 a 100 mJ/mm<sup>2</sup>. Níquel e carbono tendem a elevar o valor da EFE, enquanto que cromo, manganês e silício influem de forma a diminuir a EFE da austenita<sup>(38)</sup>.

Vários pesquisadores<sup>(27,34,36,37)</sup> reportam experimentos sobre a martensita induzida por deformação e observam que a fração induzida é inversamente proporcional à temperatura.

No trabalho de Singh<sup>(38)</sup> foi verificado que a microestrutura do aço 304 laminado a 60% à temperatura ambiente, mostra uma alta densidade de discordâncias e "pacotes" de  $\alpha'$  com fração volumétrica de 20%.

Seetharaman e Krishnan<sup>(37)</sup> estudaram a transformação

$\gamma \longrightarrow \alpha'$  em aços 316 sob tensão uniaxial e verificaram um comportamento linear entre a fração volumétrica da fase  $\alpha'$  com a tensão induzida. Além disso, sugerem que a seqüência de transformação seja  $\gamma \longrightarrow \epsilon \longrightarrow \alpha'$  e que para deformações de 0,15 se tenha um valor máximo da fase  $\epsilon$  (aproximadamente 0,10), vindo a desaparecer para deformações maiores que 0,25.

M.W. Bowkett e D. R. Harries<sup>(35)</sup> estudaram a transformação martensítica em aços austeníticos tipo 321 e verificaram gradientes de transformação  $\gamma \longrightarrow \alpha'$  da superfície para a parte interna de chapas laminadas a frio. Com 50% de redução, utilizando a técnica de difração de raios-X, obtiveram concentrações de 85% a  $6\mu\text{m}$  de profundidade com a radiação  $\text{Cu}_{K\alpha}$  e de 58% a  $23\mu\text{m}$  de profundidade com a radiação  $\text{Mo}_{K\alpha}$ . Através de medidas magnéticas, onde se analisa o material como um todo, obtiveram concentrações de 20%.

#### I.7 - INFLUÊNCIA DA ENERGIA DE FALHA DE EMPILHAMENTO NA MEDIDA DO PARÂMETRO DE REDE

Falhas de empilhamento, na seqüência de planos atômicos, causam alterações características na rede recíproca como, alargamento do perfil de difração e deslocamento do ângulo de Bragg.

A deformação plástica pode produzir falhas de empilhamento dos planos  $\{111\}$  da estrutura cfc, alterando a seqüência de empilhamentos ABCABC... para ABCA/CABC...(falha de empilhamento intrínseca) ou ABCA/C/BCABC...(falha de empilhamento extrínseca), ou ainda, ABCA/CBACBA...(falha de macla). Falhas de empilhamento intrínsecas em metais provocam um deslocamento de certos picos de difração, falhas de macla causam uma assimetria no perfil de difração, enquanto que falhas extrínsecas causam tanto assimetria quanto deslocamento dos picos de difração.

Uma expressão para avaliar a variação da posição  $2\theta$  de

difração em função da probabilidade de falha de empilhamento  $\alpha$ , que é dada por<sup>(39)</sup>:

$$\Delta(2\theta) = \frac{\pm \operatorname{tg}\theta \ 90 \ 3^{1/2} \ \alpha}{\pi^2 h_0^2 (u+b)} \sum_b \pm L_0$$

onde o fator  $(u+b)$  é a multiplicidade do plano  $(hkl)$ ,  $h_0 = |h+k+l|$  e o fator  $L_0 = h+k+l$ , somente ser considerado na somatória quando  $h + k + l = 3n \pm 1$ , sendo  $n$  um número inteiro. O deslocamento será positivo quando  $L_0 = 3n+1$  e negativo quando  $L_0 = 3n-1$ .

A Tabela I.1 apresenta valores típicos de  $\alpha$  para materiais severamente deformados, além da variação angular para diversos picos de difração para o alumínio e cobre. Vale ressaltar que a probabilidade de falha de empilhamento é proporcional ao grau de deformação.

Para metais ccc, falhas de empilhamento e maclas somente são possíveis para os planos  $\{211\}$ . O efeito da falha nos padrões de difração tem sido estudado por Guentert e Warren<sup>(39)</sup>, que concluíram que teoricamente não há possibilidade de se determinar  $\alpha$  pelo deslocamento do pico de difração e que além disso, nem mesmo experimentalmente este deslocamento é observado.

$\alpha$	Material	$(hkl)$	$\Delta(2\theta)$ (graus)	$\Delta d$ ( $10^{-6}$ nm)
1,0	Al	(311)	0,010	3,9
0,4	Al	(311)	0,004	1,6
1,0	Al	(422)	0,007	1,9
0,4	Al	(422)	0,003	0,9
2,0	Cu	(331)	0,014	4,0
3,9	Cu	(331)	0,027	12,1
2,0	Cu	(420)	0,004	0,9
3,9	Cu	(420)	0,009	2,1

Tabela I.1 - Variação angular em função de valores típicos de probabilidade de falha de empilhamento.

A primeira parte deste trabalho consiste em desenvolver um programa computacional para levantamento da função distribuição de orientações para materiais com simetria de amostra ortorrômbica e simetria do cristal cúbica.

II.1 - PROGRAMA "BIBLIOTECA"

Para a execução dos cálculos de textura, como descrito, é necessário o uso de valores numéricos para funções e coeficientes provenientes de definições matemáticas, que são independentes dos dados experimentais. Com o intuito de economizar tempo de processamento foi criado um banco de dados com os valores destas funções e coeficientes, chamado "BIBLIOTECA". A geração destes dados é efetuada através de cálculos especiais sendo função das simetrias do cristal e da amostra e também dos ângulos para os quais as figuras de polo são levantadas.

Os cálculos básicos realizados e armazenados, são:

a) coeficientes  $Q_i^{mn}$ , definidos como:

$$Q_i^{mn}(0) = i^{m+n} P_i^{mn}(0) \tag{II.1}$$

e

$$a_i^{mns} = Q_i^{ms}(0) \cdot Q_i^{ns}(0) \tag{II.2}$$

Sabendo que<sup>(24)</sup>:

$$P_i^{mn}(x) = \frac{(-1)^{l-m} i^{n-m}}{2^l (l-m)!} \frac{(l-m)! (l+m)!}{(l+m)! (l-n)!} (1-x)^{-(n-m)/2} \cdot (1+x) \frac{d^{l-n}}{dx^{l-m}} [ (1-x)^{l-m} (1+x)^{l+m} ] \tag{II.3}$$

que possui as seguintes relações de recorrência :

$$\alpha_1^{n+1} P_1^{m, n+1}(x) - \alpha_1^n P_1^{m, n-1}(x) = 2i \frac{m-n \cos \phi}{\operatorname{sen} \phi} P_1^{m, n}(x) \quad (\text{II.4})$$

$$\alpha_1^{m+1} P_1^{m+1, n}(x) - \alpha_1^m P_1^{m-1, n}(x) = 2i \frac{n-m \cos \phi}{\operatorname{sen} \phi} P_1^{m, n}(x) \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{\beta_1^{n+1} \beta_1^{n+1}}{(2l+1)(l+1)} P_{l+1}(x) + \frac{n m}{l(l+1)} P_l(x) + \frac{\beta_1^n \beta_1^m}{l(2l+1)} = x P_l^{mn}(x) \quad (\text{II.6})$$

e

$$P_1^{mn}(x) = \sum_{s=-l}^l a^{ms} e^{is\phi} \quad (\text{II.7})$$

onde

$$x = \cos \phi, \quad \alpha_1^n = [(1+n)(1-n+1)]^{1/2} \quad \text{e} \quad \beta_1^n = [(1+n)(1-n)]^{1/2} \quad (\text{II.8})$$

Na equação (II.3), calcula-se os primeiros polinômios para  $x = \cos(\pi/2) = 0$ . Utilizando-se as relações de recorrência (II.4), (II.5) e (II.6) pode-se calcular os polinômios restantes para  $\phi = \pi/2$ . Com a equação (II.1) calcula-se os valores de  $Q_1^{mn}(0)$  e, a partir daí, os valores de  $a^{ms}$  através da equação (II.2). Finalmente, a partir da equação (II.7), os valores de  $P_1^{mn}(x)$  são calculados para  $0^\circ \leq \phi \leq 90^\circ$ , com passo  $\Delta\phi = 5^\circ$ .

Por condições de simetria somente os coeficientes  $Q_1^{mn}$ , com  $l, m, n \geq 0$  e  $l \geq m \geq n$ , foram calculados e armazenados, sendo  $m = 0, 4, 8, \dots, l$  e  $n = 0, 2, 4, \dots, l$ .

b) coeficientes de simetria  $B_1^{m\mu}$

Estes coeficientes são fundamentalmente dependentes da simetria utilizada e da relação de orientação dos eixos de

simetria com o sistema de coordenadas.

Para um sistema ortorrômbico:

$$B_1^{n\nu} = \frac{c}{\text{sqr}(2)} (\delta_{n,n'} + (-1)^{n'} \delta_{n,-n'}) \quad (\text{II.9})$$

com  $c = \begin{cases} 1/\text{sqr}(2), & \text{se } \nu=1 \\ 1, & \text{se } \nu \neq 1 \end{cases}$  e  $n' = 2(\nu-1)$

sendo  $\delta$  o símbolo de Kronecker e onde, o símbolo "." indica a simetria ortorrômbica.

Para o caso cúbico, é necessário resolver o sistema de equações lineares:

$$\sum_{m=-1}^1 A_1^{m\mu} (a_1^{m\mu} - \delta_{m\mu} b_1^{\mu}) = 0 \quad (\text{II.10})$$

onde  $b_1^{\mu} = \sum_{n=-1}^1 a_1^{n\mu} e^{in\pi/2}$  e  $B_1^{m\mu} = c A_1^{m\mu} / \text{sqr}(2)$

com  $c = \begin{cases} 1, & \text{se } m=0 \\ 2, & \text{se } m \neq 0 \end{cases}$

onde o símbolo ":" indica a simetria cúbica.

Estes coeficientes foram calculados e armazenados para o valor máximo de  $l=34$ ,  $n=0,2,4,\dots,1$ ,  $m=0,4,8,\dots,1$ ,  $\mu$  e  $\nu$  variam em função de  $m$  e  $n$ , respectivamente, de acordo com o gráfico mostrado na Figura I.6.

c) Polinômios associados de Legendre e funções harmônicas esféricas simétricas de superfície:

Os polinômios associados de Legendre  $P_1^m$  são necessários para o cálculo das funções harmônicas esféricas simétricas de superfície  $K_1^{\mu}$  e são obtidos, segundo a equação:

$$\bar{P}_1^n = \sum_{s=0}^1 a_1^{ns} \cos s\phi, \quad \text{para } n \text{ par} \quad (\text{II.11})$$

$$\bar{P}_1^n = \sum_{s=0}^1 a_1^{ns} \sin s\phi, \quad \text{para } n \text{ ímpar} \quad (\text{II.12})$$

$$a_1^{ns} = [(2l+1)/2]^{1/2} i^s a_1^{ns} \quad (\text{II.13})$$

$$\dot{K}_1^\mu(\phi, \beta) = \sum_{n=-1}^1 \dot{B}_1^{n\mu} P_1^n(x) e^{in\phi} \quad (\text{II.14})$$

O conhecimento destas funções é indispensável para o cálculo da função distribuição de orientações e para levantamento da figura de polo completa através da figura de polo incompleta e, também, para o levantamento teórico de figuras não mensuráveis experimentalmente.

## II.2 - PROGRAMA "NELSON"

Este programa calcula os coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$  a partir de quatro figuras de polo incompletas.

Os dados de entrada são quatro figuras de polo incompletas, escolhidas entre os planos (100), (111), (102), (112), (122), (103) e (113).

Os dados devem entrar já corrigidos dos efeitos de desfocalização e ruído em passos de  $\Delta\alpha = \Delta\beta = 5^\circ$  até um valor máximo de  $\alpha = 70^\circ$  e  $\beta = 90^\circ$ .

Primeiramente o programa calcula os valores de  $\Lambda_1^{\mu\nu}(h_1)$ ,  $\xi_{11}^{\nu\nu'}$  e  $\alpha_{11}^{\nu\nu'}$  utilizando as equações (I.43), (I.44) e (I.45), respectivamente.

Depois, com o auxílio da equação (I.48), monta-se um sistema de equações lineares de 124 incógnitas e 124 equações, uma

vez que a série foi truncada em  $l_{\max} = 22$  e os coeficientes  $\mu$  e  $\nu$  variam de acordo com o gráfico mostrado na Figura 1.6, para as simetrias cúbica e ortorrômbica, respectivamente.

Resolvendo o sistema linear, obtém-se como dados de saída, os coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ .

### II.3 - PROGRAMA "CLMINI"

Utilizando a equação (I.35) este programa levanta a figura de polo completa dos planos (100), (110), (111), (102), (112), (103) e (113), a partir dos coeficientes  $C_1^{\mu\nu}$ , obtidos no programa NELSON.

Os gráficos das figuras de polo e da função distribuição de orientações foram feitos utilizando o programa "Statistical Analytical System" (SAS) com o procedimento GPLOT<sup>(42)</sup>.

As figuras de polo incompleta e completa obtidas com este programa são apresentadas no Capítulo IV.

Além de levantar a figura de polo completa, o programa CLMINI calcula o chamado índice J de textura, que é definido como um indicativo do grau de orientação, isto é, quanto mais orientado está o material maior é o valor de J. Este índice é dado pela seguinte equação<sup>(12)</sup>:

$$J = \int [f(g)]^2 dg = \sum_{l=0}^L \sum_{\mu=1}^{N(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} 1/(2l+1) |C_1^{\mu\nu}|^2 \quad (\text{II.15})$$

Para os extremos  $J=1$ , a amostra não apresenta textura, já para  $J=\infty$ , trata-se de um monocristal.

## II.4 - PROGRAMA "FDO"

Neste programa também é calculada a função distribuição de orientações  $f(g)=f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$  em função dos ângulos de Euler, no sistema coordenado localizado na amostra. No caso de chapas laminadas os eixos cristalinos (100), (010) e (001) coincidem com as direções de laminação (DL), transversal (DT) e normal (DN), respectivamente, quando  $\varphi_1 = \Phi = \varphi_2 = 0$ . A função  $f(g)$  pode ser definida como a fração volumétrica de grãos orientados em uma certa direção  $g$ , na forma,  $f(g)dg = dV/V$ , na qual se pode expandir  $f(g)$  em série para obter:

$$f(g) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l \sum_{n=-l}^l C_l^{\mu\nu} T_l^{\mu\nu} \quad (\text{II.16})$$

onde  $T_l^{\mu\nu}$  são os harmônicos esféricos simétricos generalizados e os símbolos ":" e "." representam as simetrias cúbica e ortorrômbica, respectivamente.

Os harmônicos esféricos simétricos generalizados  $T_l^{\mu\nu}$  podem ser expandidos em:

$$T_l^{\mu\nu} = \epsilon_n [2\pi]^{1/2} \sum_{m=0}^{1/4} B_l^{m\mu} \left[ \sum_{s=0,2}^1 a'_{l,1}{}^{ms} \cos\Phi \cos\varphi_2 \cos\varphi_1 - \sum_{s=1,3}^1 a'_{l,1}{}^{ms} \cos\Phi \sin\varphi_2 \sin\varphi_1 \right]$$

$$\epsilon = \begin{cases} 1, & \text{para } m=0 \\ 1/2, & \text{para } m \neq 0 \end{cases}$$

Os valores de  $f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$  são calculados em passos angulares de  $5^\circ$  e podem ser representados graficamente em seções de  $\varphi_1$  ou  $\varphi_2$ .

## II.5 - PROGRAMA "EULER"

Este programa foi desenvolvido para calcular os tensores elásticos, em função da orientação do cristal em relação ao sistema de medidas da tensão residual e para avaliação da curva  $d \times \text{sen}^2\psi$ , em função dos tensores de tensão  $\sigma_{ij}$  e da função distribuição de orientações. Fundamentalmente, foram utilizadas as seguintes matrizes:

a) Matriz de rotação  $g(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 - \text{sen}\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 \cos\theta & \text{sen}\varphi_1 \cos\varphi_2 + \cos\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 \cos\theta & \text{sen}\varphi_2 \text{sen}\theta \\ -\cos\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 - \text{sen}\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\theta & -\text{sen}\varphi_1 \text{sen}\varphi_2 + \cos\varphi_1 \cos\varphi_2 \cos\theta & \cos\varphi_2 \text{sen}\theta \\ \text{sen}\varphi_1 \text{sen}\theta & -\cos\varphi_1 \text{sen}\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

Os elementos das colunas indicam os cossenos diretores dos eixos primitivos em relação às direções DL, DT e DN, respectivamente.

b) Matriz  $g(d, \omega)$

$$\begin{bmatrix} (1-d_1^2)\cos\omega + d_1^2 & d_1 d_2 (1-\cos\omega) + d_3 \text{sen}\omega & d_1 d_3 (1-\cos\omega) - d_2 \text{sen}\omega \\ d_1 d_2 (1-\cos\omega) - d_3 \text{sen}\omega & (1-d_2^2)\cos\omega + d_2^2 & d_2 d_3 (1-\cos\omega) + d_1 \text{sen}\omega \\ d_1 d_3 (1-\cos\omega) - d_2 \text{sen}\omega & d_2 d_3 (1-\cos\omega) + d_1 \text{sen}\omega & (1-d_3^2)\cos\omega + d_3^2 \end{bmatrix}$$

onde " $\omega$ " indica uma rotação em torno de um vetor  $d=(d_1, d_2, d_3)$ .

c) Matriz de transformação entre os sistemas de coordenadas do laboratório e da amostra conforme descrito na equação (I.10).

O programa EULER foi desenvolvido baseado nos passos descritos abaixo:

## 1) Dados de entrada

Este programa possui as seguintes entradas:

- a) Os planos  $(h_1, k_1, l_1)$  que formam ângulos  $\psi_1$  com o plano  $(hkl)$  medido experimentalmente. Para o caso do plano medido  $(211)$ , tem-se  $(h_1, k_1, l_1)$  iguais a:  $(211)$ ,  $(311)$ ,  $(111)$ ,  $(110)$ ,  $(263)$ ,  $(261)$ ,  $(130)$  e  $(1\ 1\ 13)$
- b) O ângulo  $\phi$ , que é o ângulo entre a projeção no plano da amostra do vetor medido no plano  $(hkl)$  e a direção de laminação.
- c) A matriz  $\sigma_{ij}$ , que descreve o tensor de tensão residual.

## 2) Sequência de processamento

- a) Rotação  $g_0$  inicial, arbitrária e necessária para ajuste de vetor  $(HKL)$  paralelo à direção normal de modo que o ângulo entre  $(HKL)$  e  $(hkl)$  seja  $\psi$ .
- b) Rotação " $\omega$ " em torno de  $(HKL)$  em passos  $\Delta\omega=5^\circ$ , para acerto do ângulo  $\phi$ . Neste ponto o programa usa um processo iterativo tomando  $\Delta\omega=-\Delta\omega/2$  até que a convergência seja  $< 0.01\%$ .

Uma vez completado este passo, obtém-se um conjunto de ângulos de Euler que satisfazem as condições iniciais para  $\psi$  e  $\phi$ . Através da função distribuição de orientações adequada sabe-se, então, a fração volumétrica de grãos dada por este conjunto de ângulos. Para cada rotação " $\omega$ " em torno do vetor  $(hkl)$  tem-se um conjunto diferente de ângulos de Euler nas condições iniciais de  $\psi$  e  $\phi$ .

Portanto para cada rotação  $\Delta\omega$  em torno de  $(hkl)$  tem-se o tensor de tensão atuando em grupos de cristais com orientações diferentes, logo com diferentes constantes elásticas, e sofrendo, conseqüentemente, diferentes deformações.

Neste ponto o programa efetua rotações de  $\Delta\omega=5^\circ$  em torno do vetor (hkl) e calcula as diferentes constantes elásticas (matriz de compliância) no sistema de coordenadas do laboratório segundo a equação (I.26).

A partir daí, pode-se calcular a deformação para cada orientação segundo a equação (I.27) e a média ponderada, usando como peso a função de distribuição de orientações, segundo a equação:

$$\langle d_{\phi\psi} \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} d(\varphi_1, \theta, \varphi_2) f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) d\omega}{\int_0^{2\pi} f(\varphi_1, \theta, \varphi_2) d\omega} \quad (\text{II.17})$$

## CAPÍTULO III - PARTE EXPERIMENTAL

### III.1 - MATERIAIS UTILIZADOS

As amostras utilizadas para o desenvolvimento deste trabalho foram aço ferrítico 430 , aço austenítico 324, cobre comercial, alumínio 1145 e alumínio 3105.

Todas as amostras utilizadas foram laminadas a frio. As medidas de tensão residual e de textura foram feitas na superfície plana das chapas, que não sofreram nenhum tratamento especial.

Na Tabela III.1 são apresentados os materiais e sua composição química. Na Tabela III.2 são apresentados os graus de redução sofridos por cada amostra.

Elemento	Ni	Cr	Mn	Si	Mg	Fe	P	Mo
Material								
Al 1145	-	-	-	0,15	0,33	0,22	-	-
Al 3105	-	-	0,42	0,31	0,51	0,40	-	-
Cu	0,02	-	-	0,02	-	0,03	-	-
Aço 430	0,13	15,9	0,56	0,64	-	bal.	0,02	0,05
Aço 324	8,0	18,0	1,33	0,58	-	bal.	0,03	0,11

Tabela III.1 - Composição química dos materiais utilizados.

Material	Grau de redução (%)	Código utilizado
Cobre	88	Cu-88
Al 3105	80	Al 3105-80
Al 1145	88	Al 1145-88
Al 1145	50	Al 1145-50
Aço 324	60	A-60
Aço 324	71	A-71
Aço 430	60	F-60
Aço 430	71	F-71

Tabela III.2 - Grau de laminação dos materiais utilizados e denominação de cada amostra.

### III.2 - MEDIDAS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

Todas as medidas de difração de raios-X foram feitas usando um difratômetro Rigaku equipado com detector de cintilação e analisador de altura de pulso de radiações  $K\alpha$ . Foi utilizado um goniômetro horizontal de geometria padrão, para medidas de tensão residual e de textura, onde os eixos L1, L2 e L3 correspondem ao sistema do laboratório, conforme Figura I.2.

### III.3 - MEDIDAS DE TENSÃO RESIDUAL

As medidas de tensão residual foram efetuadas nas amostras de cobre e aço para valores de  $\psi = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 45^\circ, 50^\circ$  e  $60^\circ$ . Os valores escolhidos para  $\phi$  foram  $0^\circ, 45^\circ$  e  $90^\circ$ . Para o caso específico de  $\phi=0^\circ$  também foram medidos os valores da distância interplanar para  $\psi$  negativos. Para o cobre foi medido o plano (331) com radiação  $CuK_\alpha$  e, para o aço, plano (211) com radiação  $CrK_\alpha$ .

Todas estas medidas foram feitas com o tubo em foco.

linha, filtro apropriado para radiação  $K_{\beta}$  e as seguintes fendas:

divergência do feixe	[	$1/2^{\circ}$ de divergência horizontal
	]	fendas soller para divergência vertical
recepção do feixe	[	$0,3^{\circ}$ na fenda de recepção
	]	fendas soller para divergência vertical
		$1/2^{\circ}$ fenda de espalhamento

O ponto mais crítico para a avaliação de tensão residual em materiais é a precisão da medida da distância interplanar, a qual requer um cuidadoso alinhamento do difratômetro, do posicionamento da amostra, além de um alto número de contagens no pico de difração. Para minimizar os erros experimentais, portanto, é necessário avaliar cada uma das possíveis fontes de erros e estabelecer procedimentos experimentais.

#### III.4 - GEOMETRIA DAS MEDIDAS

Para a avaliação da tensão residual é necessário medir a variação da distância interplanar em função dos ângulos  $\phi$  e  $\psi$ , definidos na Figura I.1. . Devido à possibilidade da existência de tensões de cisalhamento foram medidos  $\psi > 0$  e  $\psi < 0$  para ângulos de  $0^{\circ}$ ,  $10^{\circ}$ ,  $20^{\circ}$ ,  $30^{\circ}$ ,  $45^{\circ}$  e  $60^{\circ}$ . Em alguns casos, devido às baixas intensidades ocasionadas pela textura do material, não foi possível delinear um pico de difração, não sendo medido, portanto, o valor de  $d_{hkl}$ . Da mesma forma, quando se comprovou não haver tensões de cisalhamento, não foram efetuadas medidas para  $\psi < 0$ .

Os ângulos  $\phi$  medidos foram  $0^{\circ}$ ,  $45^{\circ}$  e  $90^{\circ}$ , com o intuito de testar o programa de cálculo de tensões, além de se obter uma pré-avaliação dos valores  $\sigma_{33}$  e das tensões de cisalhamento, caso houvessem.

As medidas da variação da distância interplanar com o ângulo  $\psi$  foram feitas de acordo com a norma SAE <sup>(40)</sup>.

### III.5 - ALINHAMENTO DO DIFRATÔMETRO

Em medidas nas quais a posição do pico deve ser determinada é muito importante que geometricamente o difratômetro esteja bem alinhado. Bons picos de difração são obtidos, somente, quando as fendas estão corretamente colocadas em geometria parafocal. Além disso, deve-se ter muito cuidado no manuseio do equipamento. Da mesma forma, o alinhamento deve ser checado sempre, segundo o procedimento padrão. O resultado final é o feixe passando no centro do goniômetro e chegando ao centro da fenda de recepção quando o goniômetro está com  $2\theta=0^\circ$ .

### III.6 - POSICIONAMENTO DA AMOSTRA

As amostras foram coletadas da parte central das chapas laminadas para se evitar que efeitos de borda, que ocorrem durante a laminação a frio, interferissem na medida. Após isto, foram posicionadas no difratômetro de modo que o centro da amostra coincidisse com o centro do difratômetro.

O parâmetro crítico na medida do ângulo  $2\theta$  é  $\Delta x$ , (vide Figura III.1). Para um deslocamento de 0,03 mm com  $\psi = 60^\circ$  e  $2\theta = 150^\circ$ , obtém-se erros em  $\Delta\theta$  da ordem de  $0,02^\circ$ .

Para cada amostra foi acertado o alinhamento no que tange a este grau de liberdade, da seguinte forma: faz-se duas varreduras do detector entre  $-2\theta$  e  $+2\theta$ , uma sem amostra (pico 1) e outra com amostra (pico 2). O menor erro em  $\Delta x$  será obtido quando o pico 2 for a metade do pico 1.

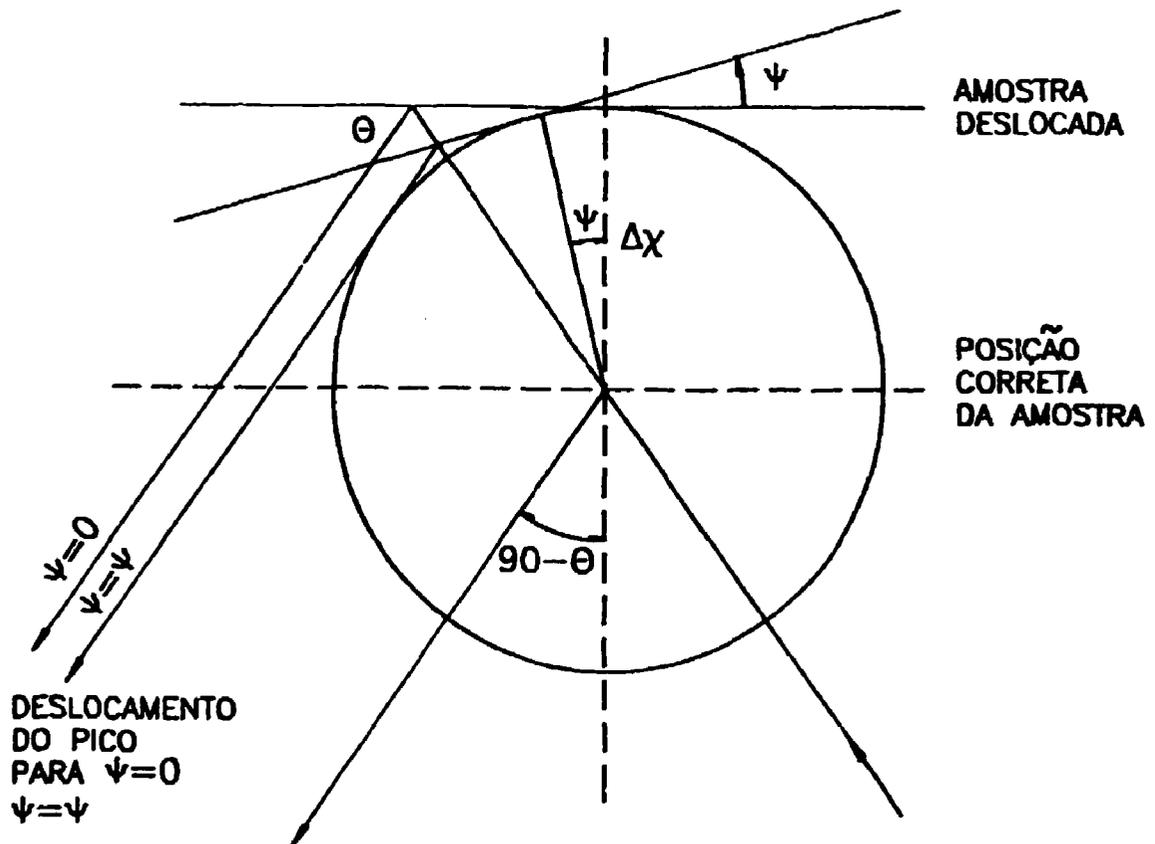


Figura III.1 - Efeito no trajeto do feixe difratado devido ao deslocamento  $\Delta x$  da amostra

### III.7 - DETERMINAÇÃO DA POSIÇÃO DO PICO

A questão de maior relevância para se traçar a curva de  $d \times \sin^2\psi$  é a avaliação do erro na medida da distância interplanar.

Dentre os vários métodos de localização do pico o mais reprodutível é o método da parábola, que utiliza todos os pontos cuja intensidade seja superior a 85%<sup>(40)</sup>. Este método foi utilizado para a determinação de todas as posições de pico. Os dados foram coletados por varredura passo a passo, no topo do perfil, com intervalos de  $0,01^\circ$  ou  $0,02^\circ$ , dependendo da taxa de contagem de cada pico, e usando o tempo de contagem necessário para acumular 100000 contagens no pico. Foi utilizado um programa existente no laboratório de Difração de Raios-X para corrigir os dados e calcular a posição do pico por este método. Em todos os casos o desvio padrão para a determinação do ângulo  $2\theta$  de Bragg foi  $\leq 0,03$ .

O efeito do dubleto  $\alpha_1/\alpha_2$ , que causa a assimetria do perfil, na resolução da posição do pico, pode ser minimizado pela escolha de fendas convenientes. O grau de resolução do dubleto depende do grau de deformação e do ângulo de difração. Para  $2\theta > 155^\circ$ , a separação do dubleto aumenta rapidamente, e mesmo para deformações moderadas, o dubleto pode ser resolvido com fendas normais. Considerando, então, os ângulos onde foram realizadas as medidas e que os dados foram tomados somente no topo do perfil, o efeito da assimetria pode ser desprezado.

### III.8 - MEDIDAS DE TEXTURA

Para a execução deste trabalho foi projetado e construído um goniômetro automático de textura adaptável ao goniômetro SG-8 de fabricação Rigaku, controlado por motores de passo e coleta de dados em microcomputador da linha APPLE, com as

**seguintes características técnicas:**

**1- faixa de ângulos mensuráveis:**

**a) método de reflexão de Schulz**

$$\alpha : 0^{\circ} \text{ a } 70^{\circ}$$

$$\beta : 0^{\circ} \text{ a } 360^{\circ}$$

$$2\theta : 15^{\circ} \text{ a } 160^{\circ}$$

**b) método de transmissão**

$$\alpha' : 15^{\circ} \text{ a } 70^{\circ}$$

$$\beta : 0^{\circ} \text{ a } 360^{\circ}$$

$$2\theta : 15^{\circ} \text{ a } 116^{\circ}$$

**2- rotação  $\alpha$  ( qualquer passo múltiplo de  $0,02^{\circ}$ )**

**3- rotação  $\beta$  ( qualquer passo múltiplo de  $0,01^{\circ}$ )**

Na Figura I.8 é mostrada a geometria do goniômetro de dois eixos ( $\alpha$  e  $\beta$ ) que deve ser adaptado ao goniômetro de varredura SG-8, também de dois eixos ( $\alpha'=\theta$  e  $2\theta$ ), formando o conjunto para análise de textura.

Especificamente para este trabalho foram levantadas para todas as amostras, figuras de polo incompletas pelo método de Schulz ( $\alpha_{\max} = 70^{\circ}$  e  $\beta_{\max} = 90^{\circ}$ ) com passos  $\Delta\alpha=5^{\circ}$  e  $\Delta\beta=5^{\circ}$ . Para estas amostras foram feitas as curvas do ruído (background) e da desfocalização do feixe, para posterior correção destes efeitos. A curva de desfocalização do feixe foi levantada utilizando-se uma amostra de silício policristalino e escolhendo-se picos de difração que mais se aproximavam do ângulo, no qual foi medida a figura de polo. Os dados do ruído foram obtidos colocando-se o detector em posição  $2\theta + \Delta\theta$ , com  $\Delta\theta$  variando de  $2^{\circ}$  a  $3^{\circ}$ . Não foi utilizado um padrão físico para normalização das intensidades relativas. No lugar disto, foi utilizado um programa, segundo Arce Ch. et alii <sup>(21)</sup>, que calcula os valores das intensidades de amostras ao acaso, baseado nos dados obtidos na amostra texturada.

Para os materiais de estrutura cfc os planos cristalográficos escolhidos para levantamento das figuras de polo foram : (111), (200), (220) e (311). Para os de estrutura ccc, os planos foram: (110), (200), (211) e (310).

## CAPÍTULO IV - RESULTADOS E ANÁLISE DE DADOS

### IV.1 - FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE ORIENTAÇÕES

#### IV.1.1 - Análise das Amostras de Cobre

Foi utilizado o cobre laminado a 88% para verificar os resultados obtidos com o tratamento dos dados das figuras de polo incompletas, com as quais se obtém os coeficientes  $C_1^{UV}$ , e a partir daí, as figuras de polo completas e a FDO através dos programas computacionais já discutidos.

As vantagens da utilização deste material estão em sua textura de laminação muito característica e uma vasta coleção de dados apresentados na literatura <sup>(12,28,43)</sup>.

Na Figura IV.1a. são mostradas as figuras de polo incompleta e completa obtidas neste trabalho e na Figura IV.1b. a figura de polo completa (111) obtida por Hirsch e Lücke <sup>(28)</sup>. Comparando-as, percebe-se grande semelhança. Além disso, ao medir-se os polos com uma projeção estereográfica verifica-se a existência dos mesmos polos publicados por estes autores.

Na Figura IV.2 é apresentada a figura de polo completa (200) do cobre, onde foram colocados os polos medidos na figura de polos (111) e pode ser verificado que os mesmos coincidem.

Nas Figuras IV.1a. e IV.2, verifica-se que, nas regiões comuns para as figuras de polo completas e incompletas ( $\alpha_{\max} = 70^\circ$ ), os valores calculados teoricamente coincidem com os valores obtidos experimentalmente.

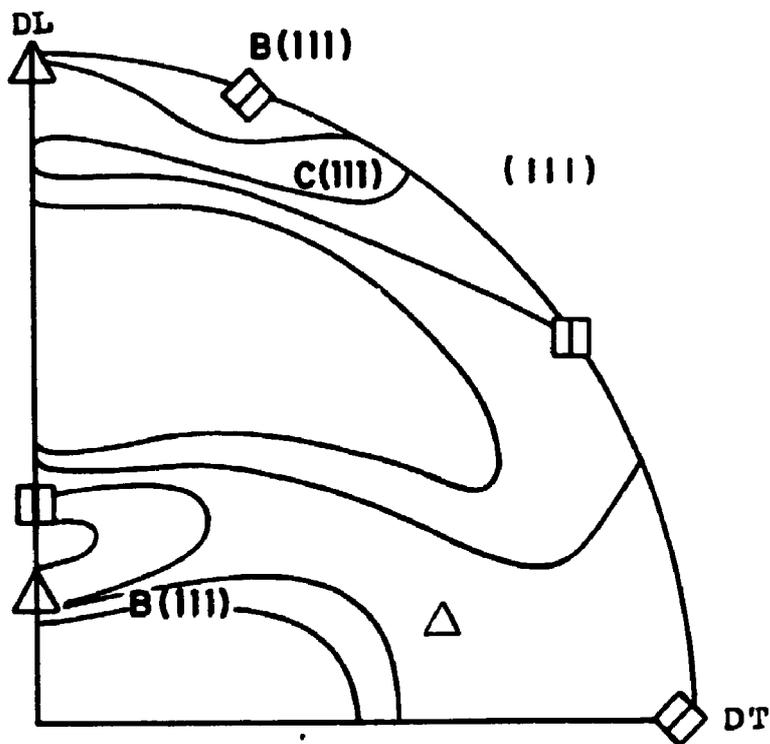
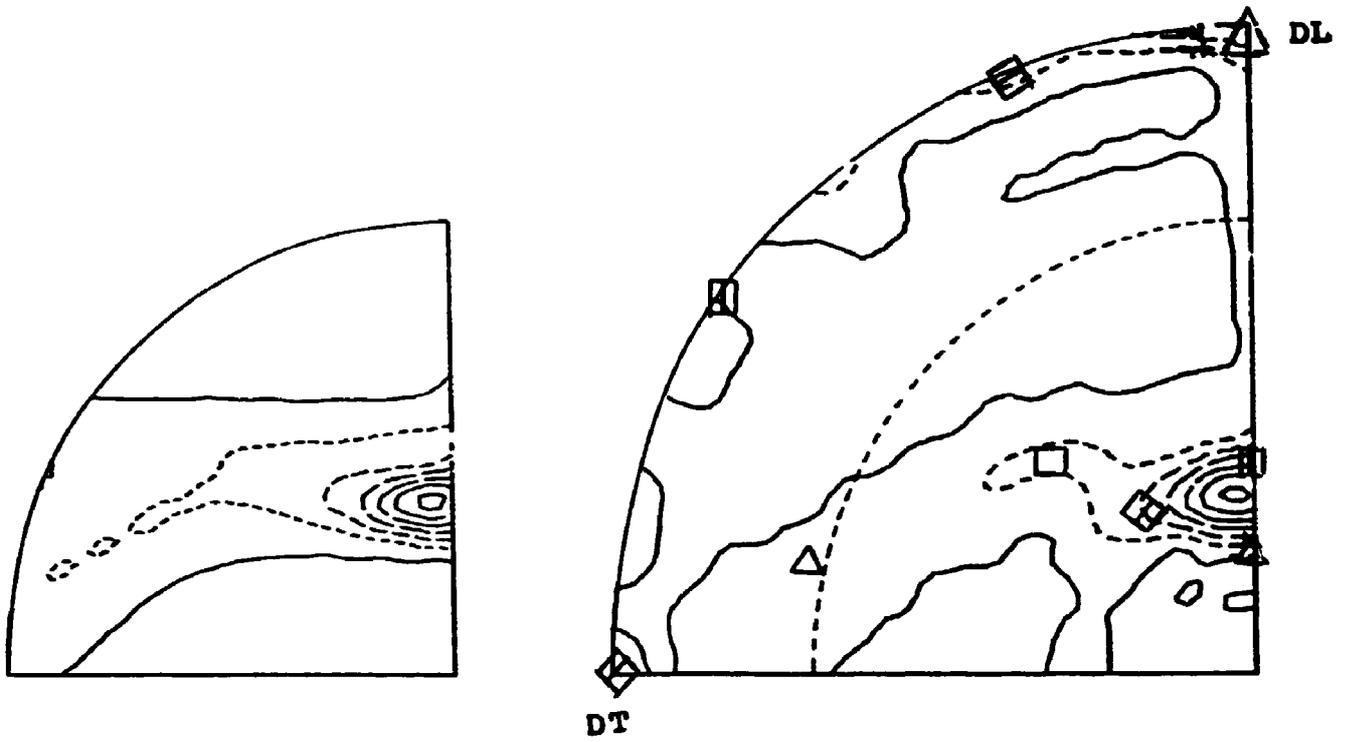


FIGURA IV.1 - Figuras de polo (111) completa e incompleta da amostra de Cu-88, onde determina-se as orientações:  $\Delta$   $\{112\}\langle 111\rangle$ ;  $\blacklozenge$   $\{011\}\langle 211\rangle$ ;  $\blacksquare$   $\{011\}\langle 100\rangle$ ;  $\circ$   $\{100\}\langle 001\rangle$

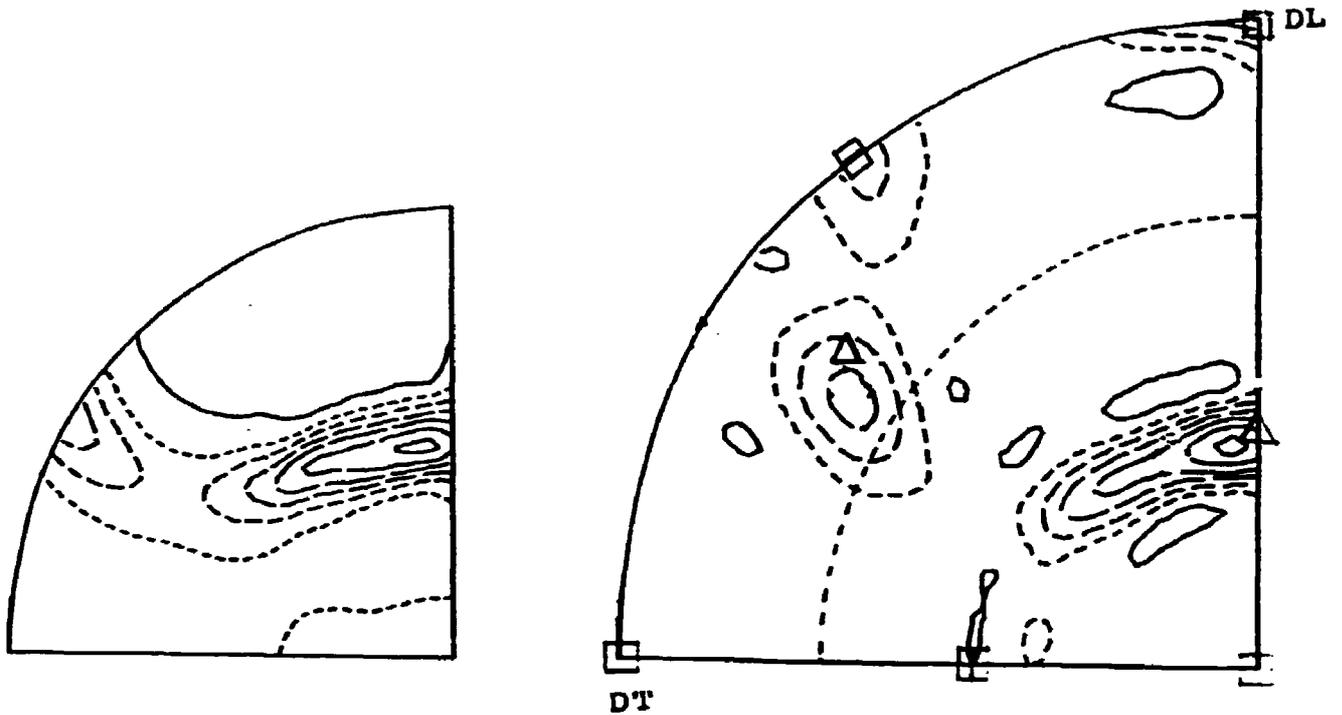
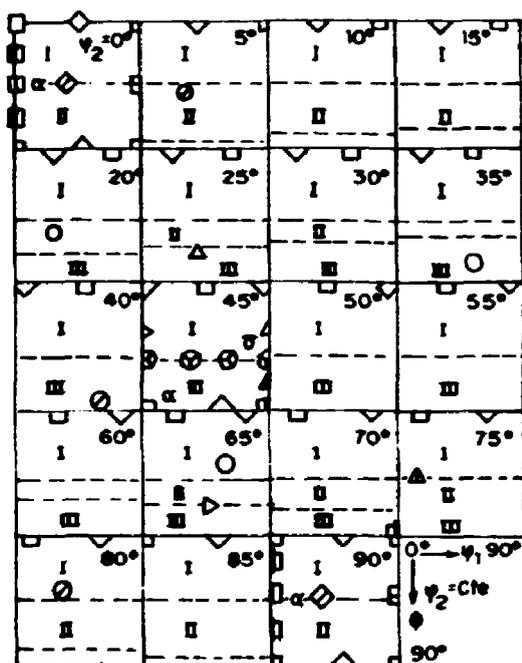


FIGURA IV.2 - Figuras de polo (200) completa e incompleta da amostra Cu-88, onde os polos estão localizados de acordo com as orientações da Figura IV.1.

$\Delta$   $\{112\}\langle 111\rangle$ ;  $\diamond$   $\{011\}\langle 211\rangle$ ;  $\blacksquare$   $\{011\}\langle 100\rangle$ ;  $\square$   $\{100\}\langle 001\rangle$

Para se verificar o funcionamento dos programas de uma outra maneira, deve-se analisar os resultados obtidos para a função distribuição de orientações. Isto pode ser feito medindo-se os ângulos de Euler ( $\varphi_1, \varphi, \varphi_2$ ) para os quais ocorrem os valores máximos de orientações (vide Figura IV.3). Na Figura IV.4 é mostrada a FDO obtida neste trabalho para o cobre em seções constantes de  $\varphi_2$ ; comparando-os com os valores obtidos por Lücke<sup>(28)</sup>, isto é, nos casos particulares ( $90^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ ),

$\varphi_2 = 45^\circ$ , e que representam as orientações  $\{112\}\langle 11\bar{1}\rangle$ ,  $\{100\}\langle 001\rangle$  e  $\{110\}\langle 1\bar{1}2\rangle$ , respectivamente, observa-se os mesmos valores para  $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ . Nesta figura também são apresentadas as outras orientações preferenciais presentes obtidas pela medida dos ângulos de Euler.



símbolo	$\{hkl\}$	$\langle uvw \rangle$	nome
$\Delta$	$\{112\}$	$\langle 11\bar{1}\rangle$	C
$\circ$	$\{123\}$	$\langle 63\bar{4}\rangle$	S
$\diamond$	$\{011\}$	$\langle 21\bar{1}\rangle$	B
$\square$	$\{011\}$	$\langle 100\rangle$	G
$\triangle$	$\{255\}$	$\langle 5\bar{1}\bar{1}\rangle$	TC
$\odot$	$\{111\}$	$\langle 11\bar{2}\rangle$	Y
$\ominus$	$\{111\}$	$\langle 1\bar{1}0\rangle$	Z
$\diamond$	$\{001\}$	$\langle 110\rangle$	rotW
$\square$	$\{011\}$	$\langle 01\bar{1}\rangle$	rotG
$\odot$	$\{168\}$	$\langle 21\bar{1}\rangle$	S/B
$\oplus$	$\{025\}$	$\langle 100\rangle$	$W_{RD}$
$\square$	$\{001\}$	$\langle 100\rangle$	W
$\triangleright$	$\{112\}$	$\langle 1\bar{1}0\rangle$	A

FIGURA IV.3 - Algumas orientações preferenciais no espaço de Euler em seções constantes de  $\varphi_2$ .

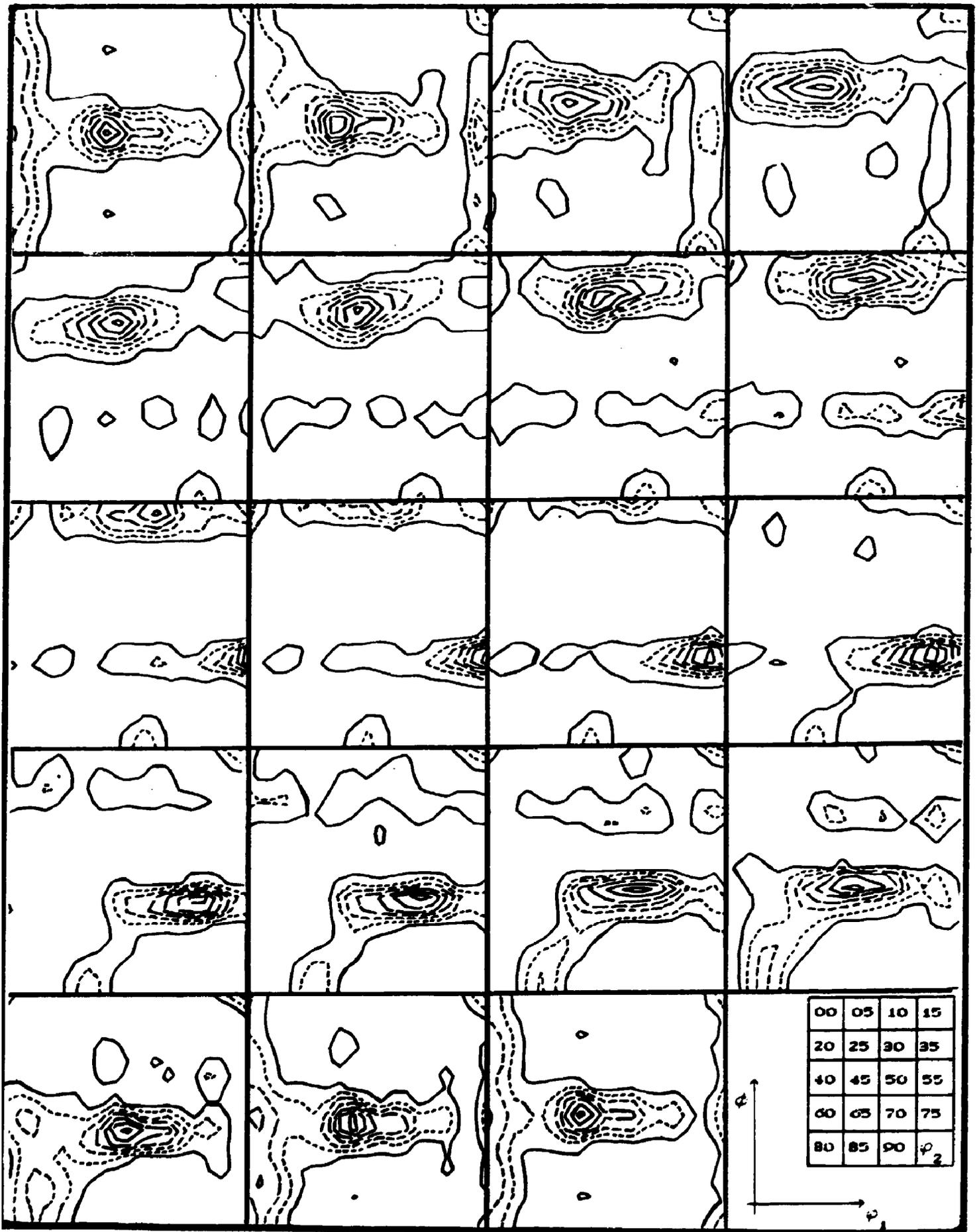


FIGURA IV.4 - Função distribuição de orientações da amostra Cu-88 em seções constantes de  $\varphi_2$ .

Uma outra análise da FDO pode ser feita através da avaliação de sua intensidade em um tubo de distribuição de orientações. Geralmente é utilizado o tubo tipo  $\alpha$  (fibra- $\alpha$ ), onde avalia-se a variação da intensidade da FDO, em uma orientação cristalograficamente orientada (neste caso a orientação  $\langle 110 \rangle$ ), ou do tipo  $\beta$  (fibra- $\beta$ ), que não é cristalograficamente orientada, onde coleta-se os valores máximos de cada seção  $\varphi_2 = \text{constante}$  e plota-se  $f(g)$  em função do próprio  $\varphi_2$ .

Nas Figuras IV.5 e IV.6 é mostrado o comportamento destas fibras.

Para o cobre é verificado que a fibra- $\alpha$ , apresenta um ponto de máximo em  $\varphi_1 = 35^\circ$ , o que representa a orientação B, isto é,  $\{011\}\langle 2\bar{1}1 \rangle$ , outro máximo em  $\varphi_1 = 0^\circ$ , orientação  $\{011\}\langle 100 \rangle$ ; em  $\varphi_1 = 53^\circ$ , orientação  $\{=011\}\langle 1\bar{1}1 \rangle$ ; em  $\varphi_1 = 70^\circ$ , orientação  $\{011\}\langle 1\bar{2}2 \rangle$  e em  $\varphi_1 = 90^\circ$ , orientação  $\{011\}\langle 01\bar{1} \rangle$ .

Para a fibra- $\beta$ , verifica-se um máximo em  $\varphi_2 = 45^\circ$ , que é chamada orientação C, isto é,  $\{112\}\langle 11\bar{1} \rangle$  e outro em  $\varphi_2 = 90^\circ$ , orientação B. É verificado também um máximo de baixa intensidade em  $\varphi_2 = 65^\circ$ , representando a orientação S  $\{123\}\langle 745 \rangle$ .

O índice J de textura calculado para o cobre, foi o mais alto entre todas as amostras analisadas, sendo igual a 196, o que indica um alto grau de orientação preferencial.

#### IV.1.2 - Análise das Amostras de Alumínio

O alumínio também é um material que apresenta textura de deformação bem característica, embora a intensidade das orientações seja dependente dos elementos presentes na liga.

As Figuras IV.7 e IV.8 apresentam as figuras de polo

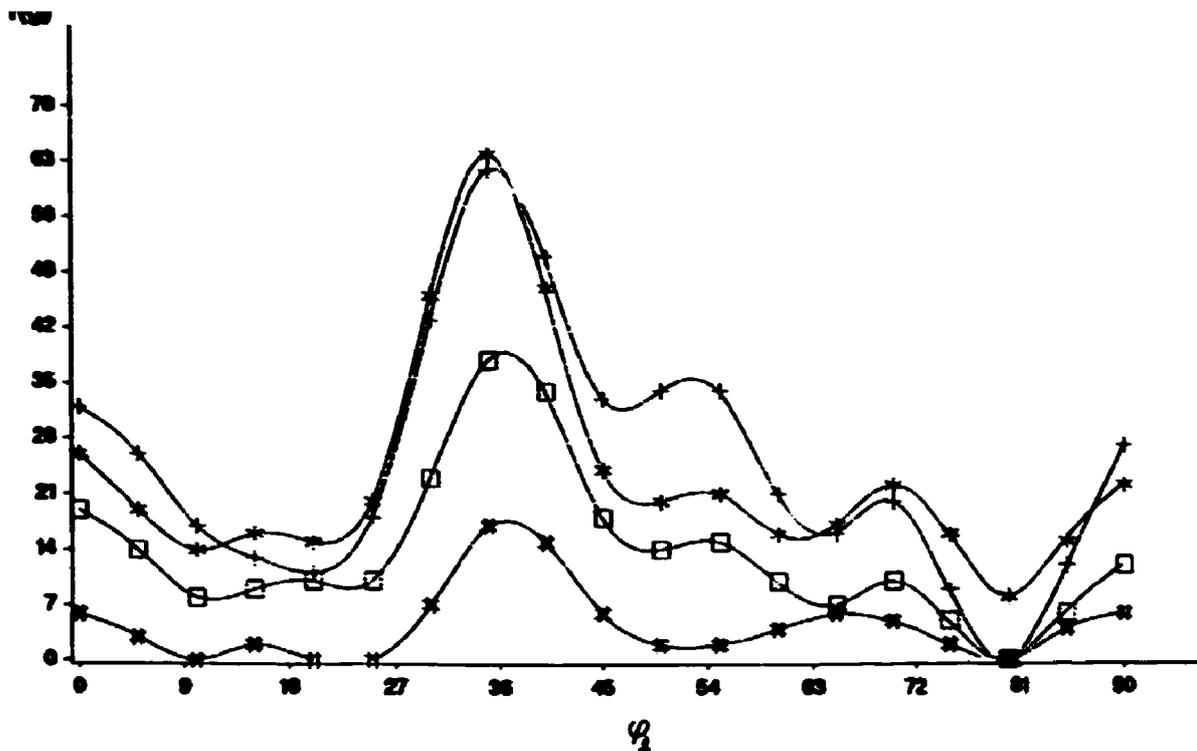


FIGURA IV.5 - Função distribuição de orientações ao longo da fibra  $\alpha$ . Os símbolos designam as amostras:  
 + Cu-88, \* Al 1145-88, # Al 1145-50, □ Al 3105-80.

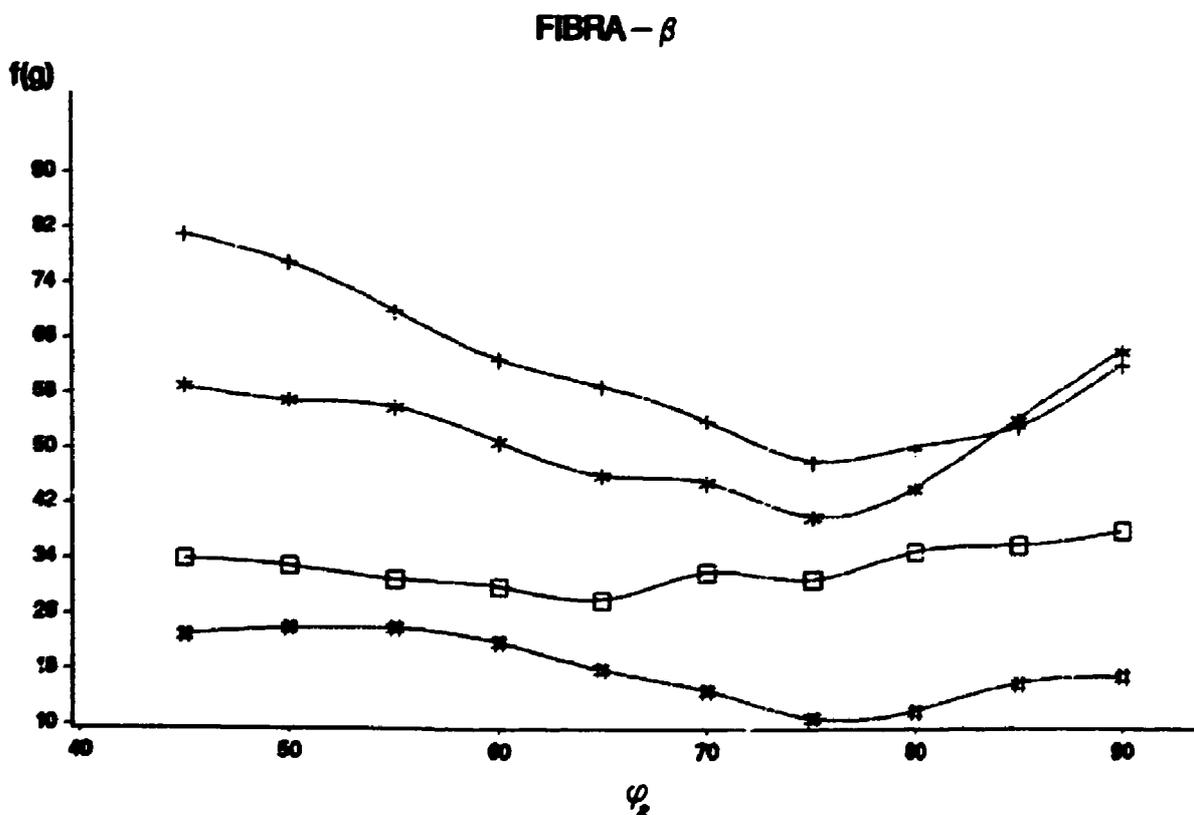
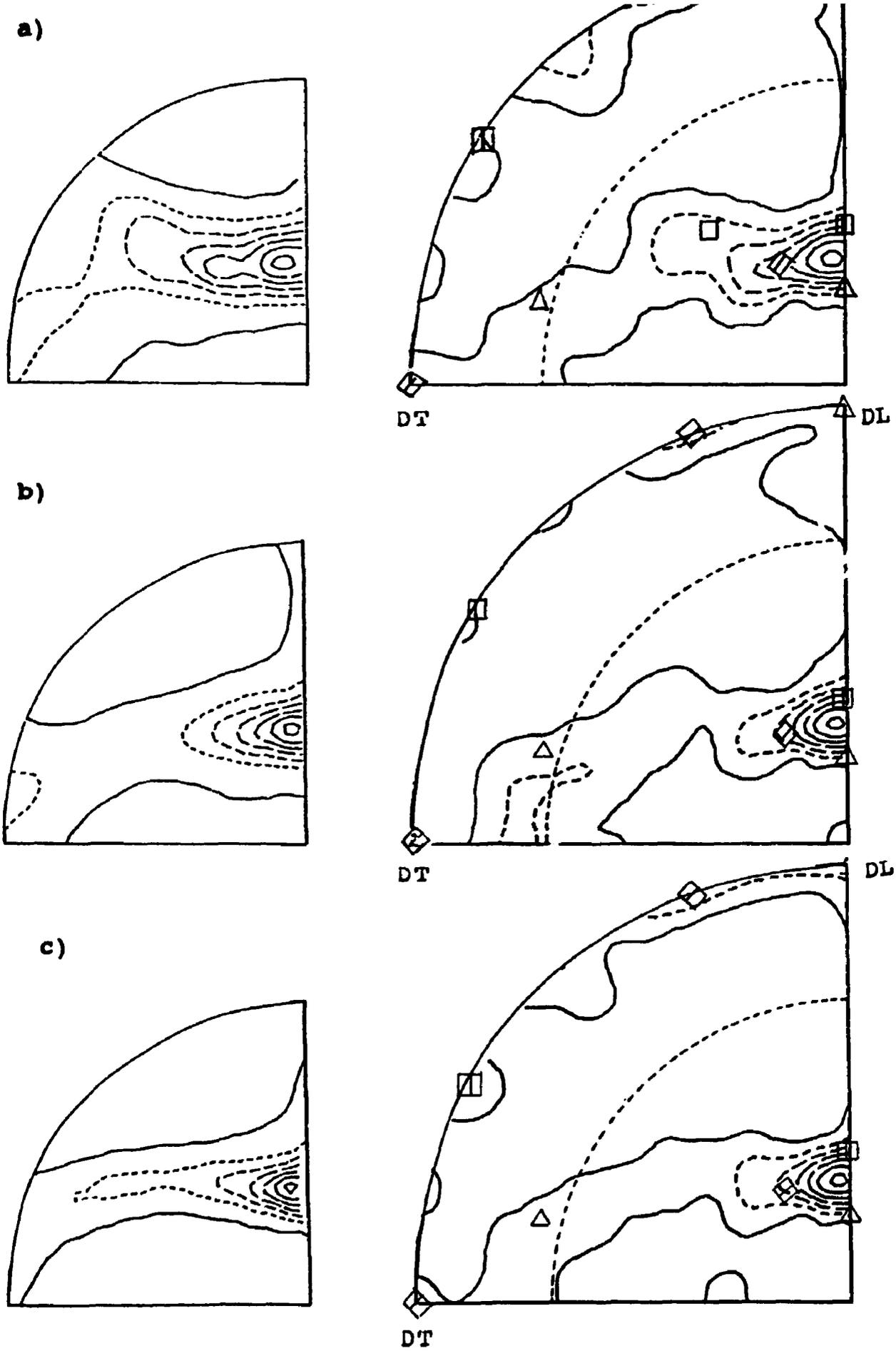


FIGURA IV.6 - Função distribuição de orientações ao longo da fibra  $\beta$ . Os símbolos designam as amostras:  
 + Cu-88, \* Al 1145-88, # Al 1145-50, □ Al 3105-80.



**FIGURA IV.7 - Figuras de polo (111) completa e incompleta para as amostras: (a) Al 3105-80; (b) Al 1145-50 e (c) Al 1145-88.**  
 $\Delta$   $\{112\}\langle 111\rangle$ ;  $\diamond$   $\{011\}\langle 211\rangle$ ;  $\blacksquare$   $\{011\}\langle 100\rangle$ ;  $\blacksquare$   $\{100\}\langle 001\rangle$

completa e incompleta obtidas neste trabalho para o Al 1145 laminado a frio 50 e 88% e para o Al 3105 laminado à 80%. Verifica-se uma boa concordância entre as regiões comuns em ambas as figuras de polo. Os resultados mostram que, qualitativamente, as orientações preferenciais são as mesmas, exceto para a amostra Al 3105, que possui uma componente a mais,  $\{100\}\langle 001\rangle$ . O índice de textura para cada amostra é apresentado na Tabela IV.1, onde verifica-se que a textura é mais pronunciada na amostra Al 1145-88 que na amostra Al 1145-50.

Amostra	Índice J
Al 1145 - 50%	22
Al 1145 - 88%	117
Al 3105 - 80%	64

Tabela IV.1 - Índice J de textura das amostras de alumínio.

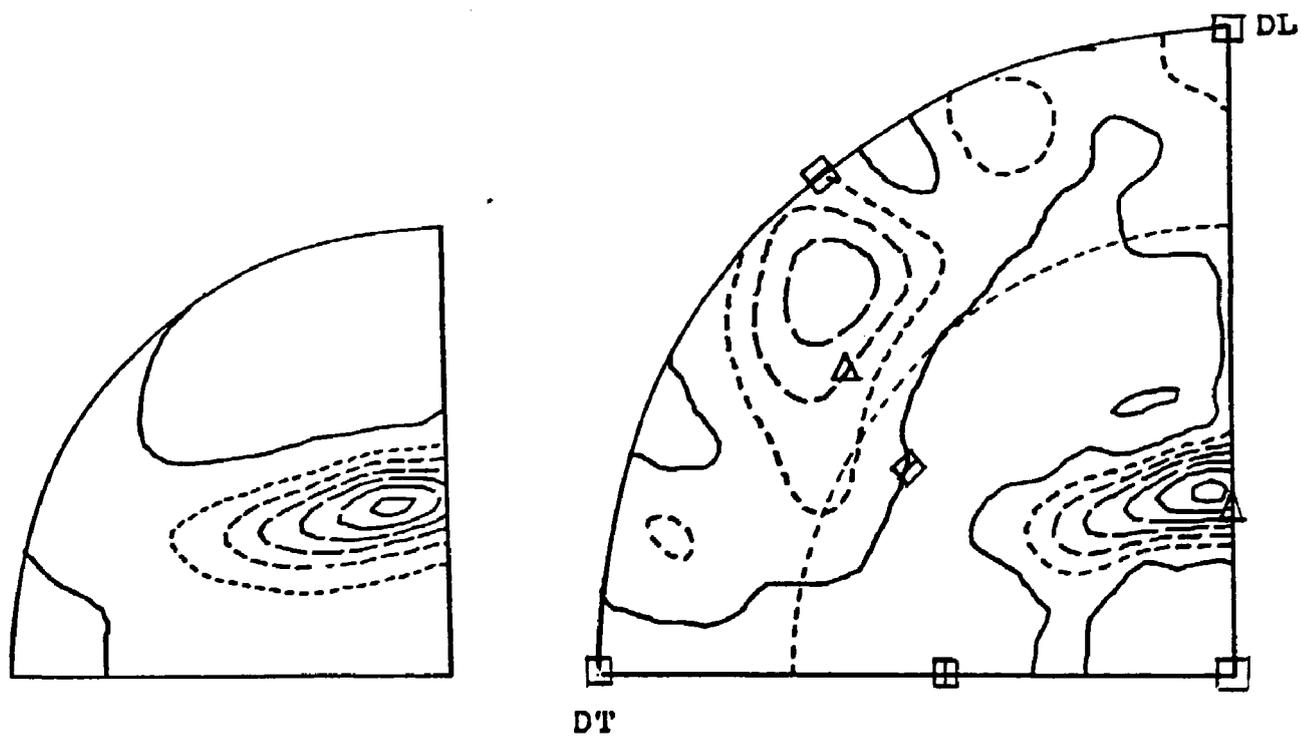


FIGURA IV.8 - Figuras de polo (200) completa e incompleta para a amostra de Al 1145-50.

$\Delta \{112\}\langle 111\rangle$   $\diamond \{011\}\langle 211\rangle$ ;  $\blacksquare \{011\}\langle 100\rangle$ ;  $\square \{001\}\langle 100\rangle$

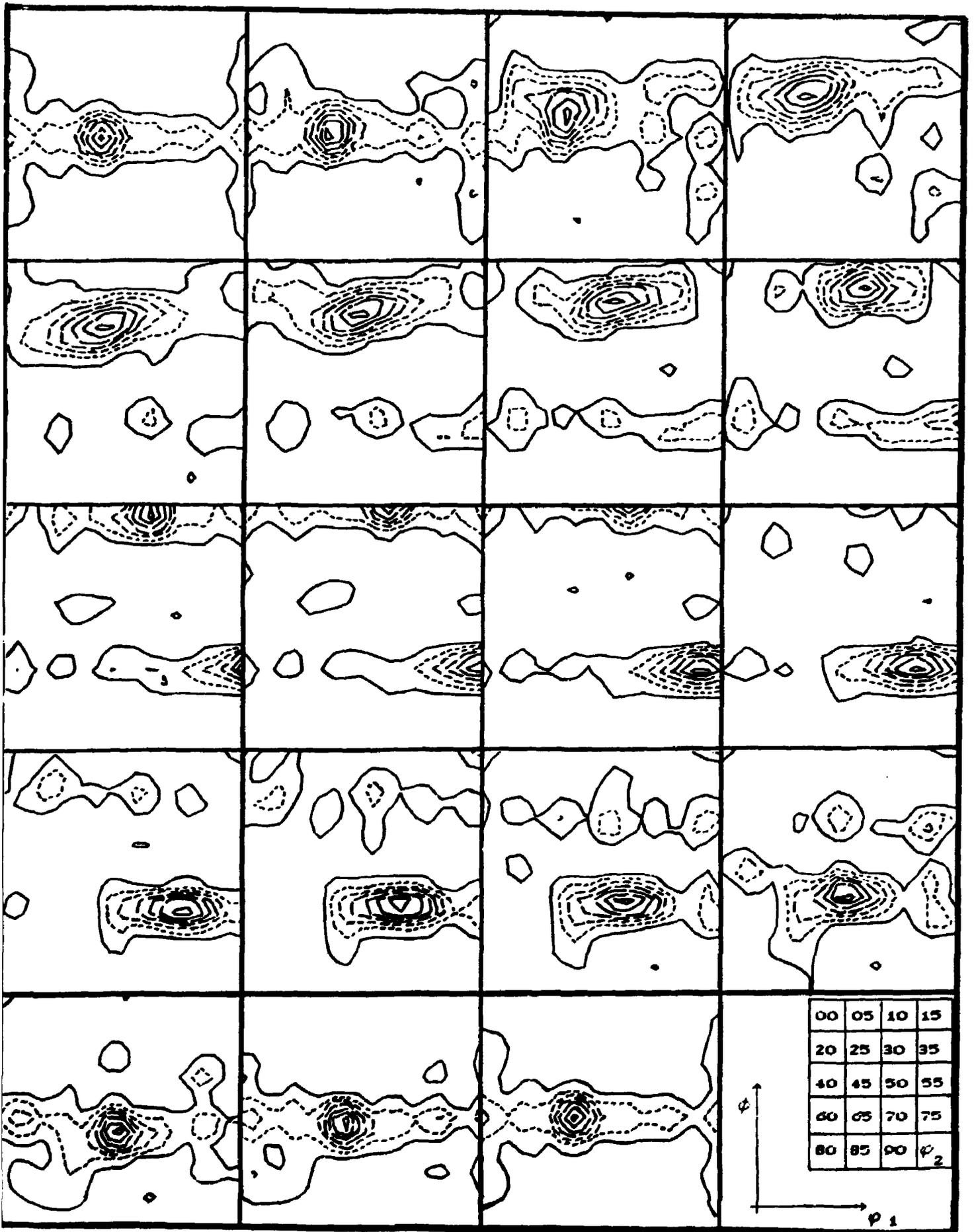


FIGURA IV.9 - Função distribuição de orientações da amostra de Al 1145-88.

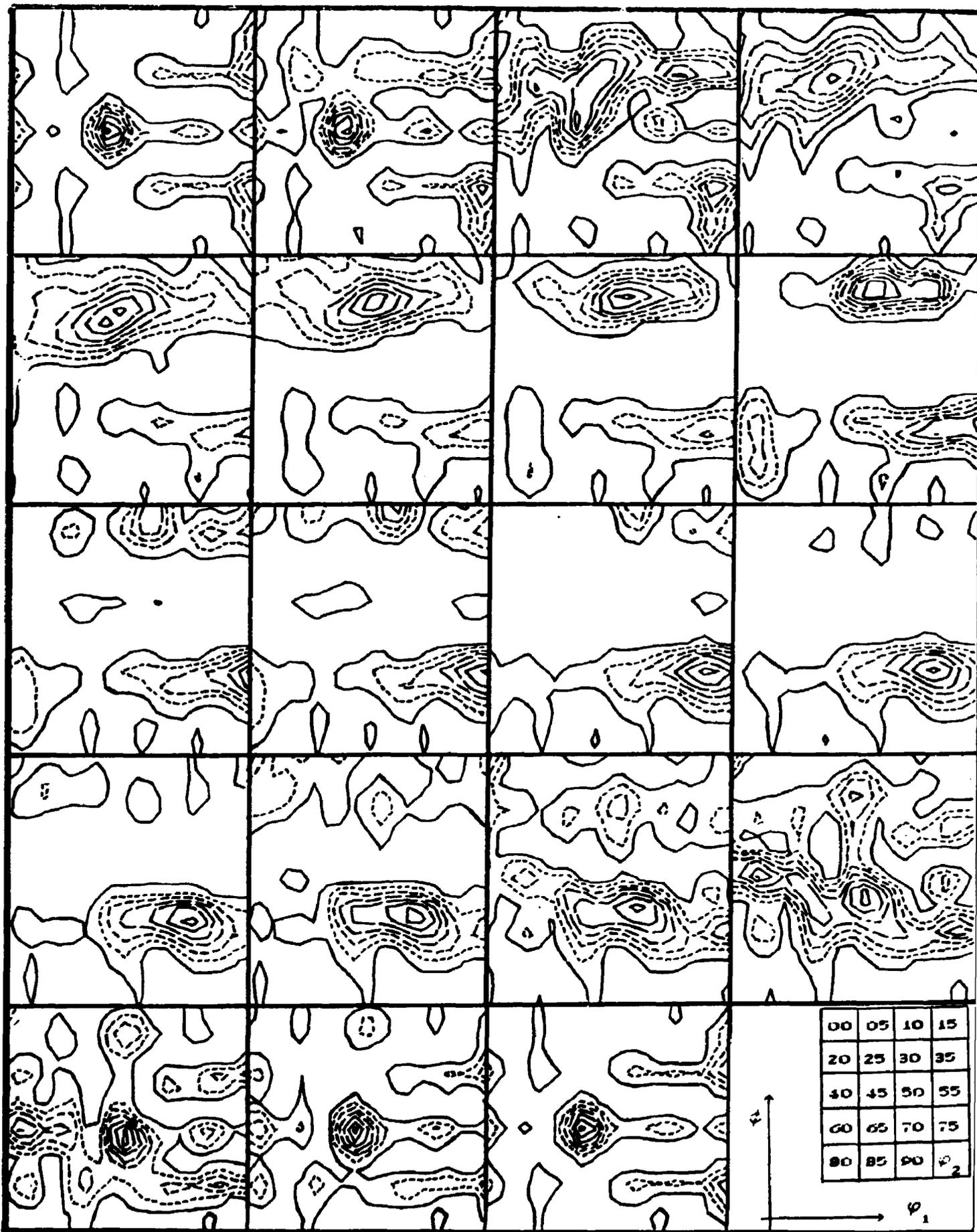


FIGURA IV.10 - Função distribuição de orientações da amostra de Al 1145-50.

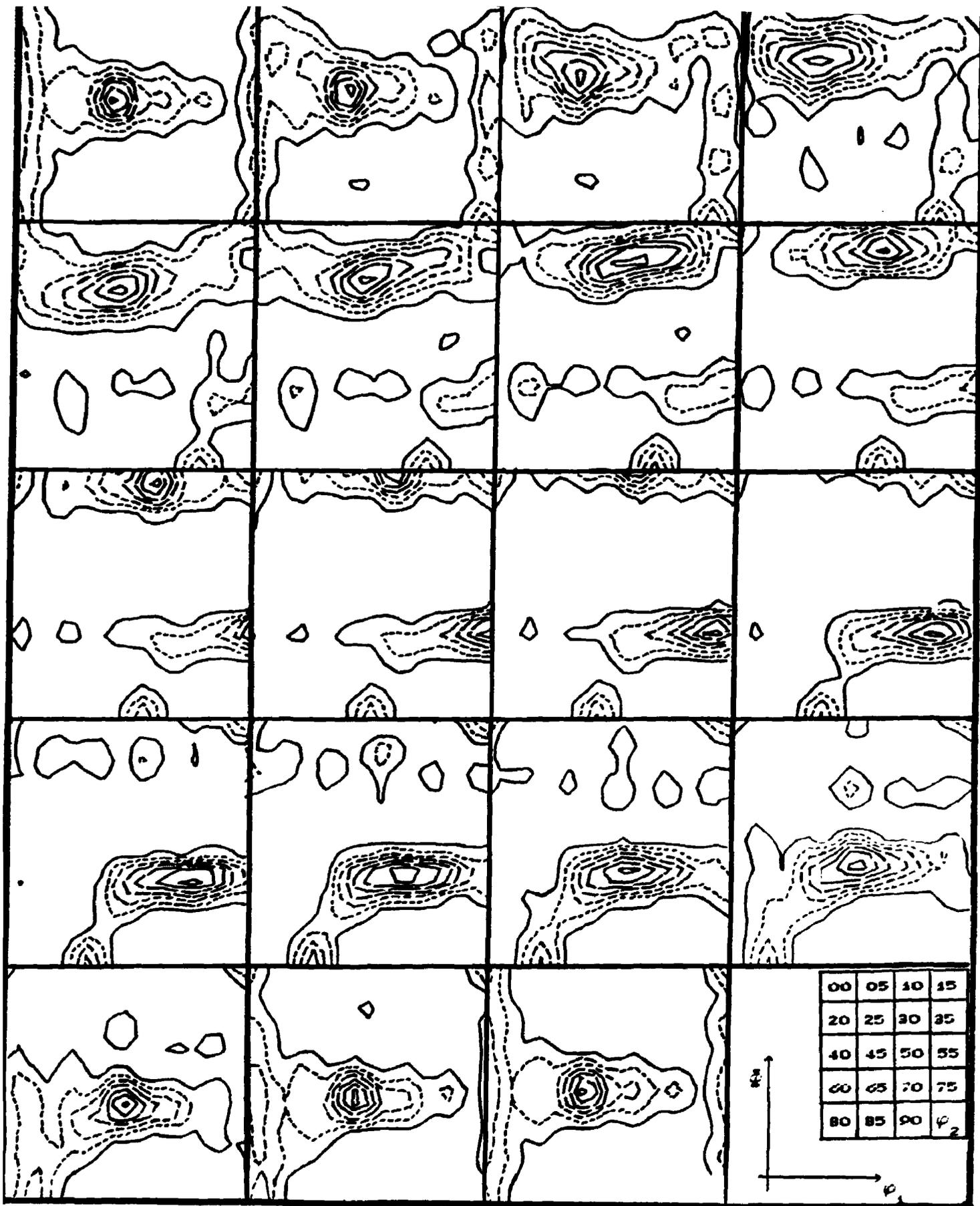


FIGURA IV.11 - Função distribuição de orientações da amostra de Al 3105-80.

... a função distribuição de orientações para ...  
dada na Figuras IV.9 a IV.11.

As funções distribuição de orientações (FDO) das amostras Al 3105-80 e Al 1145-88 mostram muitas similaridades, exceto pelo aparecimento da orientação cubo, que pode ser vista em  $\varphi_1 = 45^\circ$ ,  $\phi = 0^\circ$  e  $\varphi_2 = 45^\circ$  na FDO da amostra Al 3105-80. A amostra Al 1145-50 apresenta uma FDO muito parecida com a amostra Al 1145-88, no que tange às orientações preferenciais de seus polos principais. A primeira amostra apresenta um menor grau de orientação, além de algumas orientações secundárias de baixa intensidade, mostrando claramente ser um estágio intermediário para uma textura mais bem definida, o que também é verificado pelo índice J de textura.

A fibra  $\alpha$ , na Figura IV.5, representa uma orientação  $\langle 110 \rangle$  paralela à direção normal com máximos nas direções  $\langle 211 \rangle$  ( $\varphi_1 = 35^\circ$ ) denominada orientação B;  $\langle 100 \rangle$  ( $\varphi_1 = 0^\circ$ ), denominada orientação G,  $\langle 122 \rangle$  ( $\varphi_1 = 70^\circ$ ) e outra na direção  $\langle 01\bar{1} \rangle$  ( $\varphi_1 = 90^\circ$ ). Além destas orientações comuns às três amostras de alumínio, ocorrem máximos na orientação  $\{011\}\langle 1\bar{1}1 \rangle$  ( $\varphi_1 = 55^\circ$ ), para as amostras de Al 1145-88 e Al 3105-80.

A fibra- $\beta$ , apresentada na Figura IV.6 tem início na orientação B, se desloca até a orientação C, isto é,  $\{112\}\langle 111 \rangle$ , onde  $\varphi_1 = 85^\circ$ ,  $\phi = 30^\circ$  e  $\varphi_2 = 45^\circ$ . Além disso, mostra um ponto de máximo na orientação S ( $\{123\}\langle 634 \rangle$ ),  $\varphi_1 = 54^\circ$ ,  $\phi = 33,5^\circ$  e  $\varphi_2 = 70^\circ$ , para as amostras Al 1145-88 e Al 3105-80. Pelo fato desta orientação não ocorrer na amostra Al 1145-50, conclui-se que esta é função de uma alta deformação. Verifica-se também que a relação de intensidades das orientações B e C é maior quanto maior for a deformação e obviamente as frações orientadas são maiores quanto maior for a deformação. Os resultados obtidos são muito similares aos obtidos por Lücke e Engler<sup>(41)</sup>. Além disso, é mostrado no comportamento da fibra- $\beta$  que apesar das três amostras apresentarem praticamente as mesmas

orientações preferenciais, através de testes realizados em cada orientação.

#### IV.1.3 - Análise das Amostras de Aço

Depois da deformação a frio, as duas amostras de aço austenítico apresentaram estrutura cristalina ccc. Os difratogramas de raios-X, utilizando tubo de cromo, detectaram apenas o plano (220) da estrutura cfc da austenita, raia esta de muito baixa intensidade. Estes resultados concordam plenamente com os resultados encontrados por outros pesquisadores<sup>(35,36,37,38,44)</sup>. Portanto, todas as medidas de difração de raios-X realizadas nestas amostras, foram efetuadas na fase ccc.

As funções distribuição de orientações calculadas por meio das figuras de polo incompletas para as amostras: A-60, A-71, F-60 e F-71 são apresentadas nas Figuras IV.12 a IV.15. As Figuras IV.16 a IV.19 apresentam as figuras de polo (200) e (220) completa e incompleta destas amostras.

Verifica-se nas figuras de polo que a região de superposição entre as figuras completa e incompleta, possui o mesmo comportamento, e que todas as figuras de polo do mesmo plano cristalográfico, também tem os mesmos polos principais, isto é, as orientações  $\{332\}\langle\bar{1}\bar{1}3\rangle$ ,  $\{111\}\langle\bar{1}10\rangle$ ,  $\{001\}\langle100\rangle$  e  $\{111\}\langle11\bar{2}\rangle$ .

A diferença entre as figuras de polo, quanto aos seus polos secundários, isto é, polos de baixa intensidade, é de difícil interpretação, uma vez que sua definição é muito ruim.

Analisando a função distribuição de orientações temos um resultado quantitativo de maior confiabilidade.

Observando as Figuras IV.12 a IV.15, nota-se que todas as FDO apresentam muitas similaridades, exceto a FDO da amostra A-60,

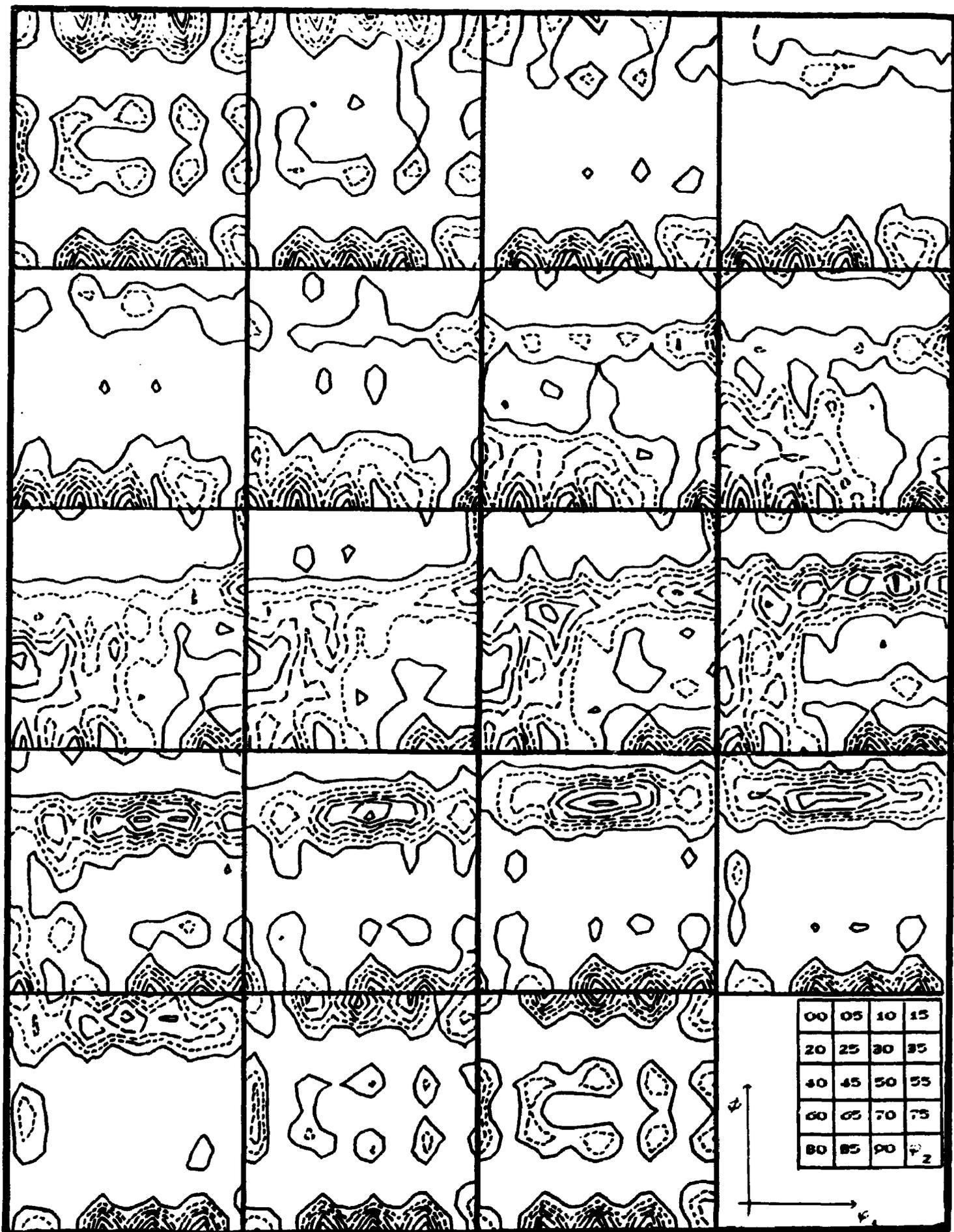


FIGURA IV.12 - Função distribuição de orientações da amostra A-71.

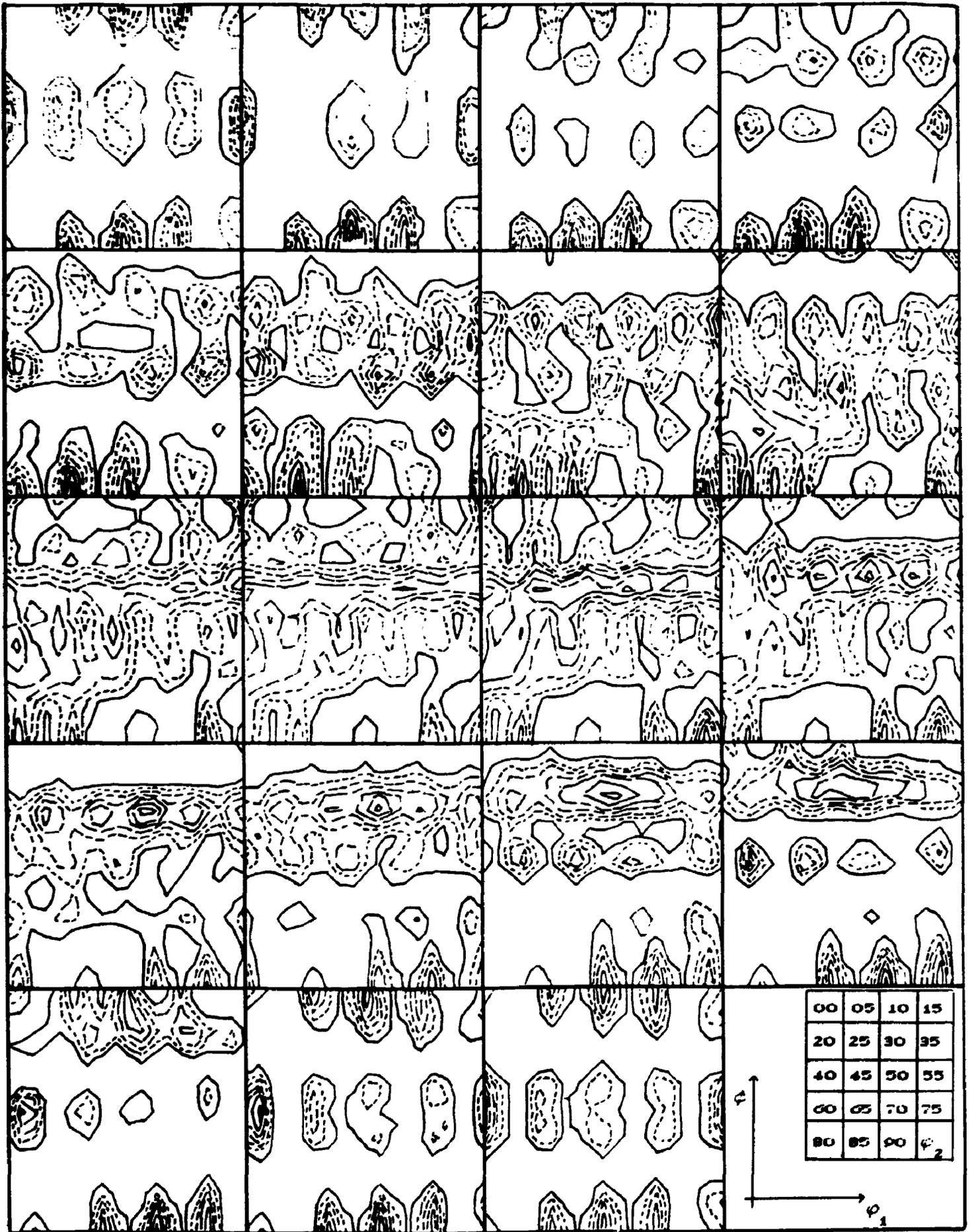


FIGURA IV.13 - Função distribuição de orientações da amostra A-60.

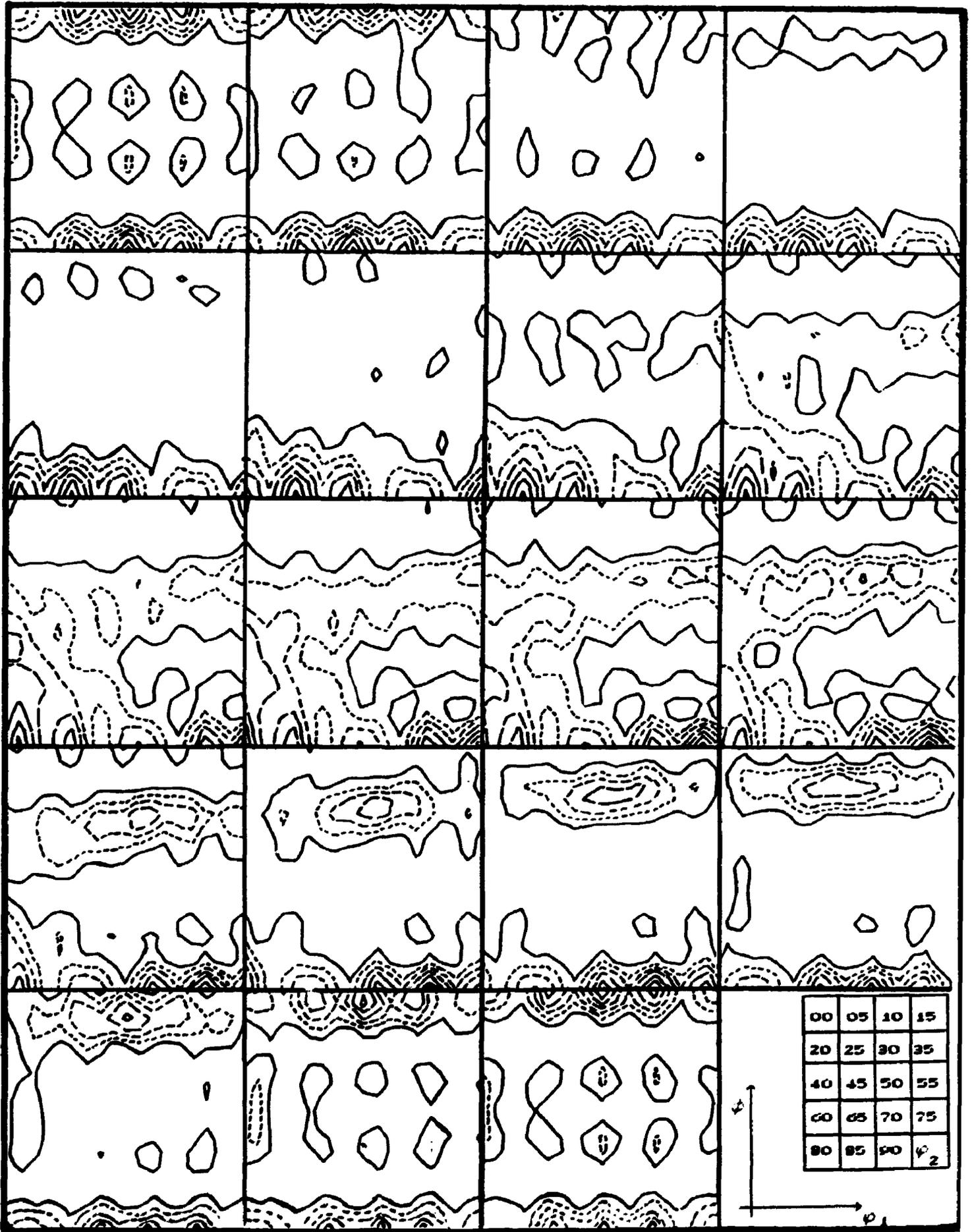


FIGURA IV.14 - Função distribuição de orientações da amostra F-71.

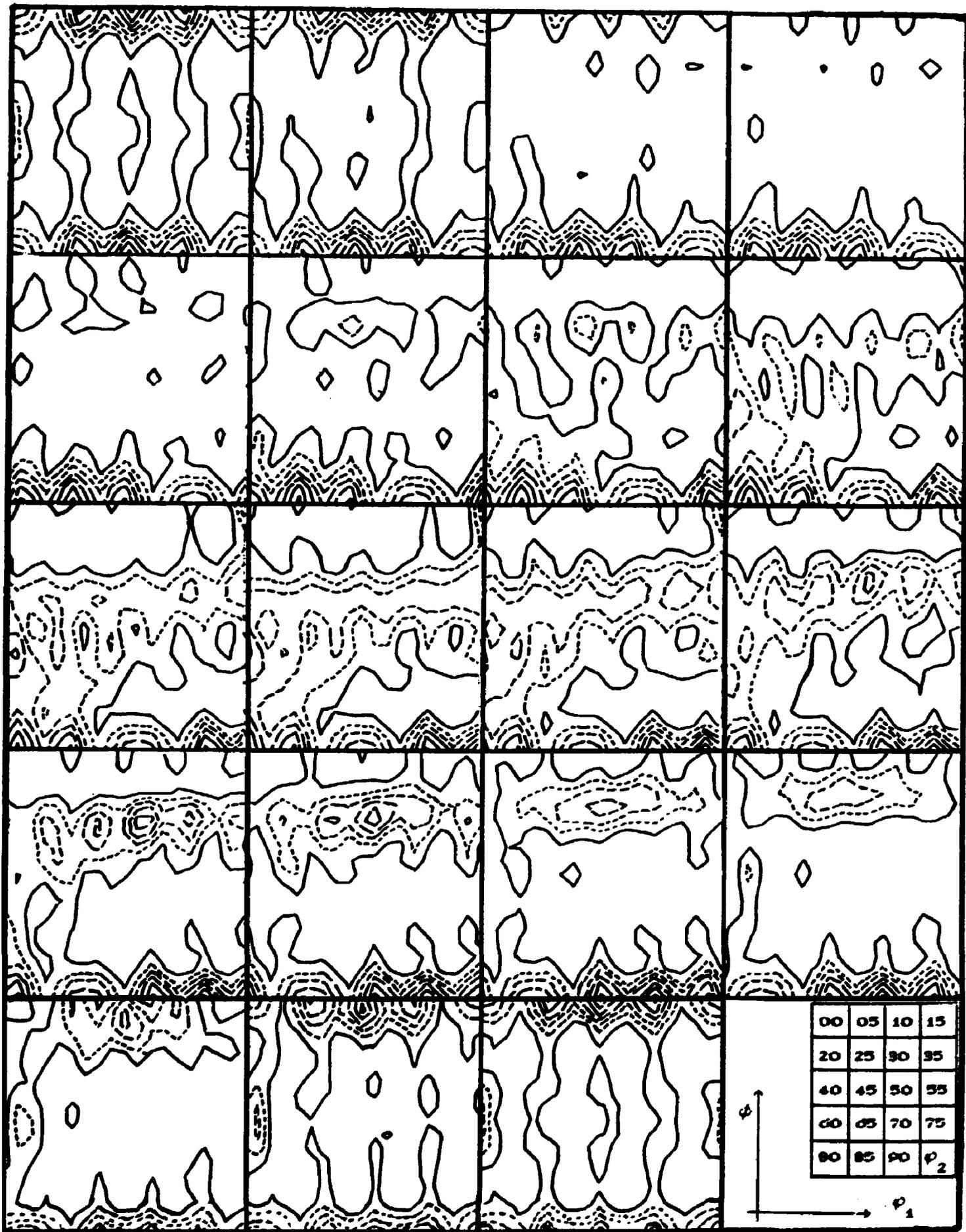
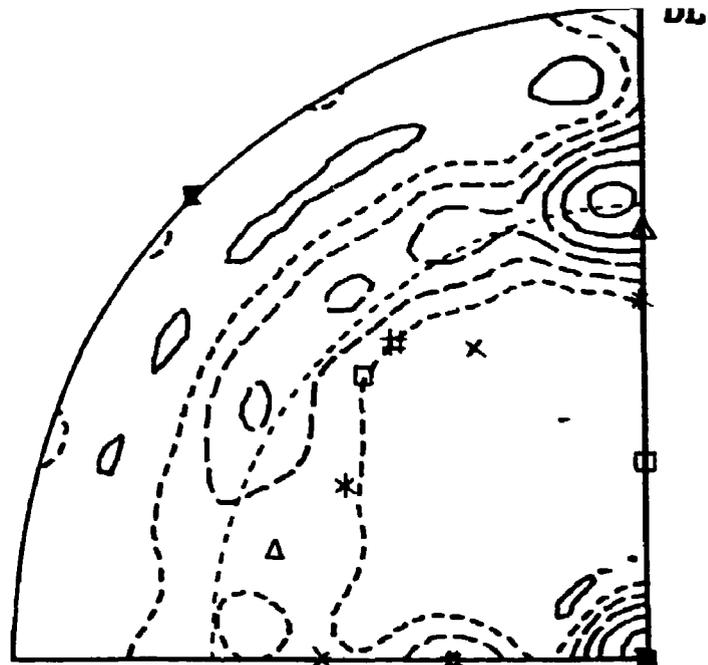
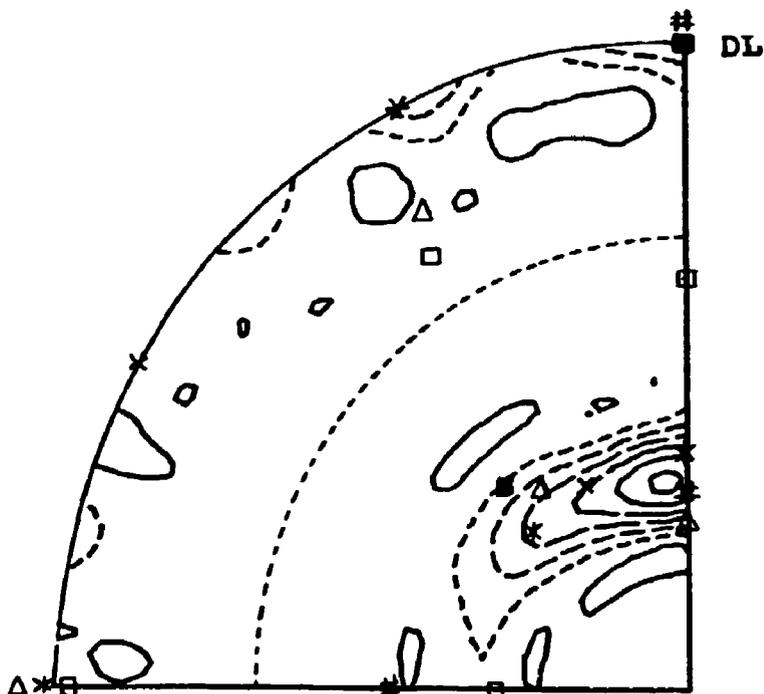
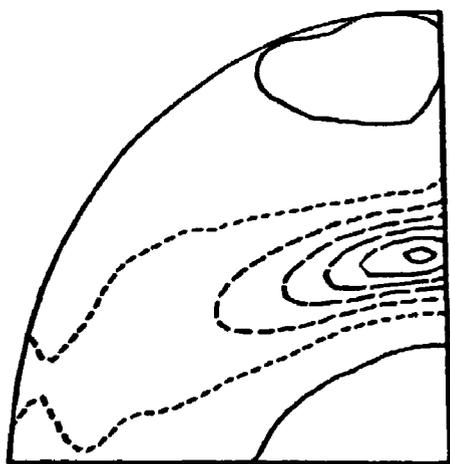


FIGURA IV.15 - Função distribuição de orientações da amostra F-60.



DT



DT

FIGURA IV.16 - Figuras de polo (200) e (220) completas e incompletas da amostra A-60.

■ {001}<110>; Δ {332}<1̄1̄3>; # {112}<1̄1̄0>; x {111}<1̄1̄0>;  
 □ {112}<1̄1̄1>; \* {111}<112̄>

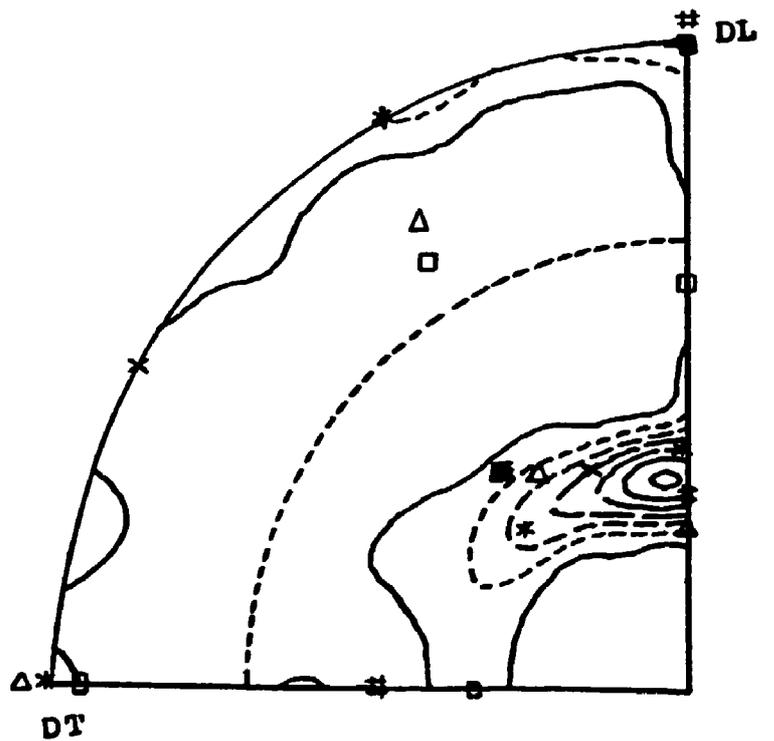
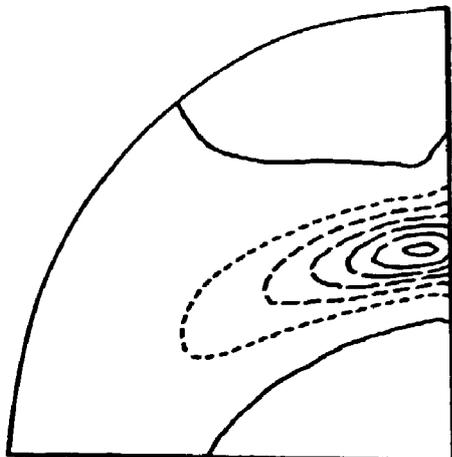
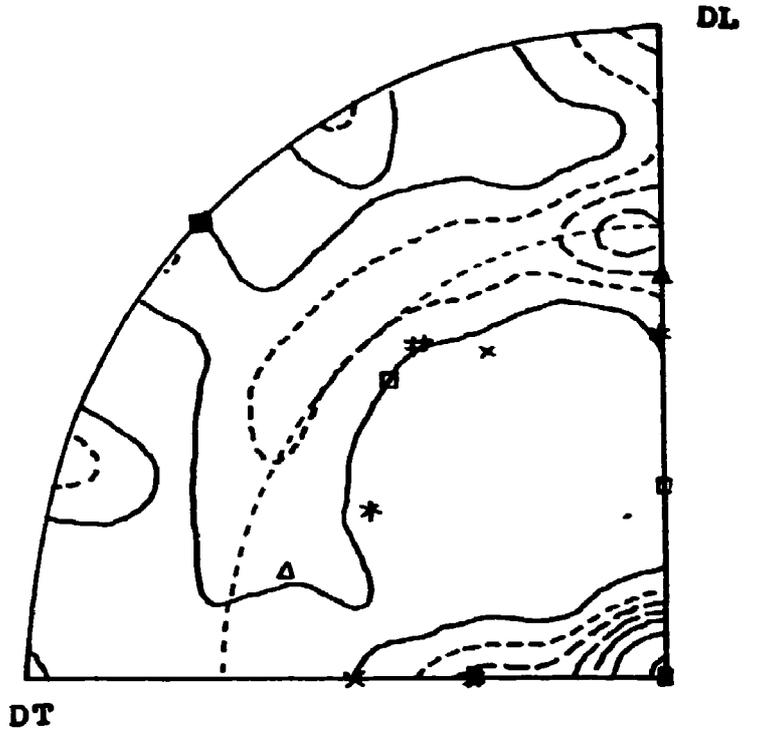
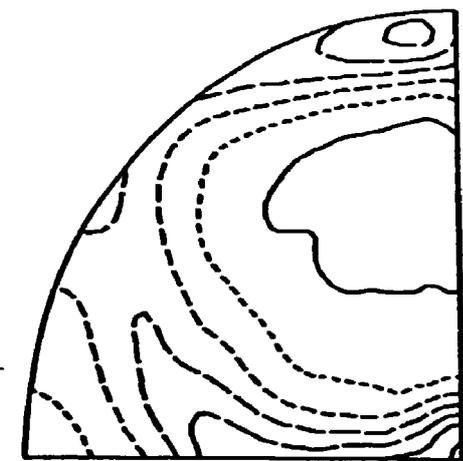
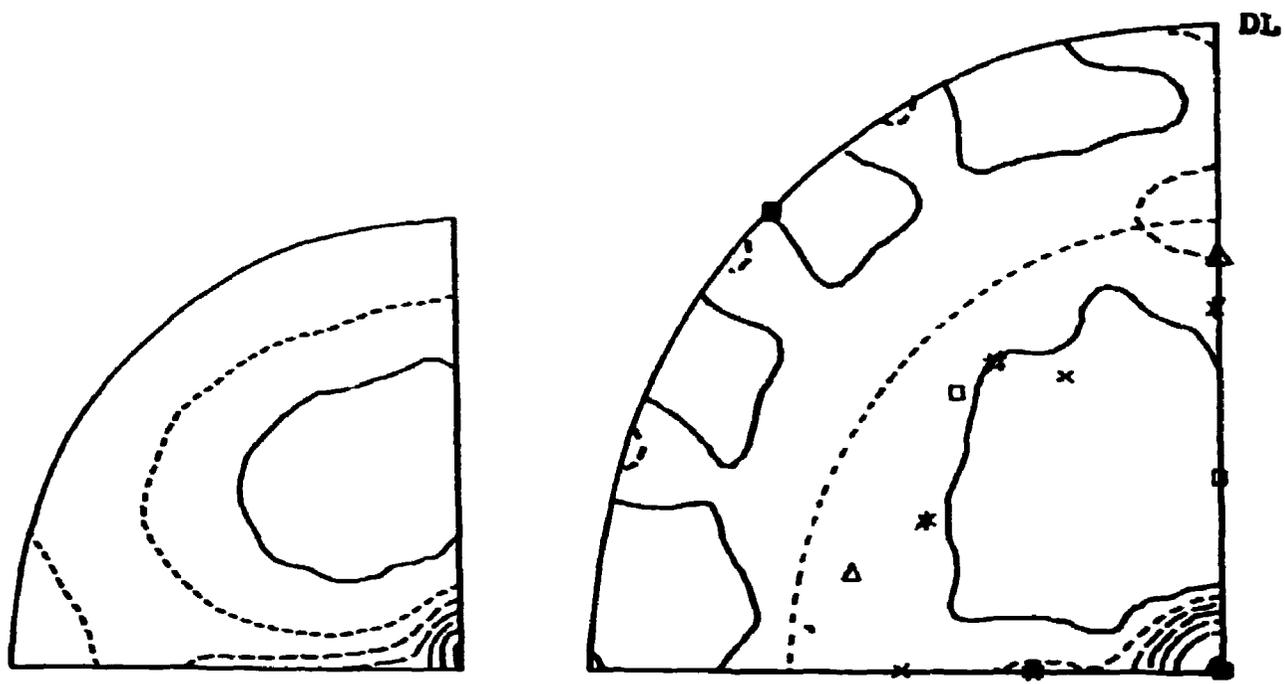
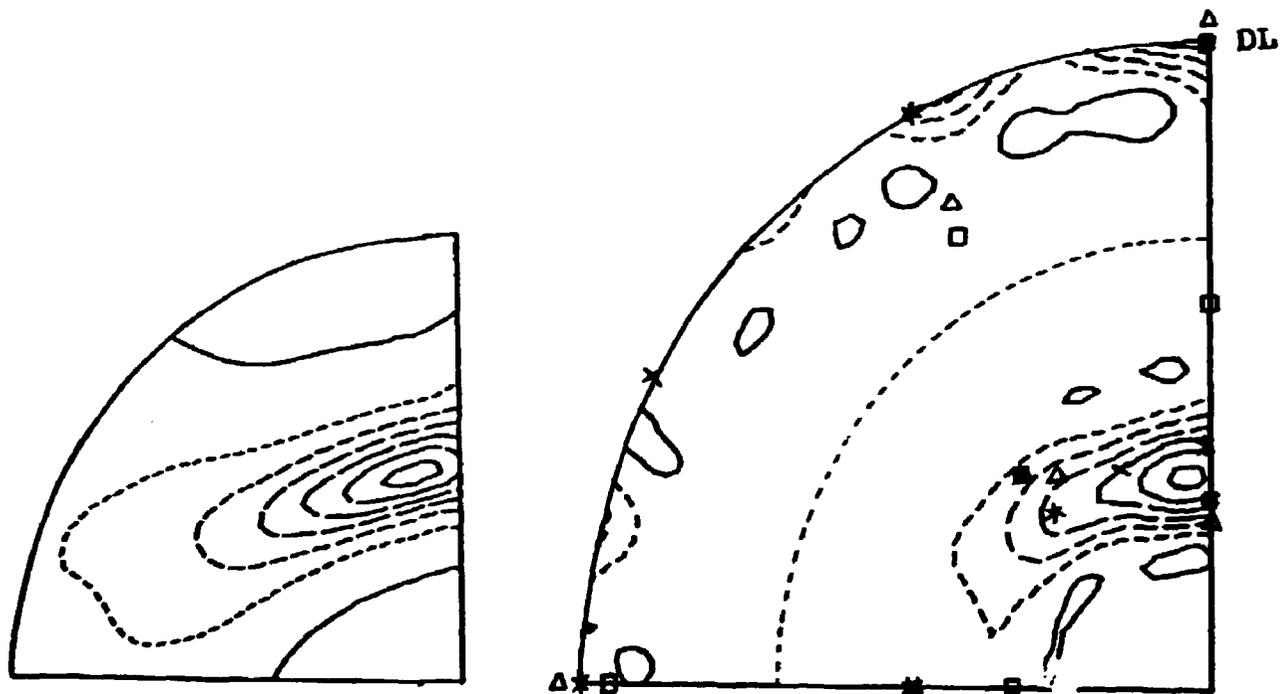


FIGURA IV.17 - Figuras de polo (200) e (220) completas e incompletas da amostra A-71.

■  $\{001\}\langle 110\rangle$ ;  $\Delta$   $\{332\}\langle \bar{1}\bar{1}3\rangle$ ; #  $\{112\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ ; x  $\{111\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ ;  
 □  $\{112\}\langle 1\bar{1}1\rangle$ ; \*  $\{111\}\langle 11\bar{2}\rangle$



DT



DT

**FIGURA IV.18** - Figuras de polo (200) e (220) completas e incompletas da amostra F-60.  
 ■ {001}<110>; Δ {332}< $\bar{1}\bar{1}3$ >; # {112}< $\bar{1}\bar{1}0$ >; x {111}< $\bar{1}\bar{1}0$ >;  
 □ {112}< $\bar{1}\bar{1}1$ >

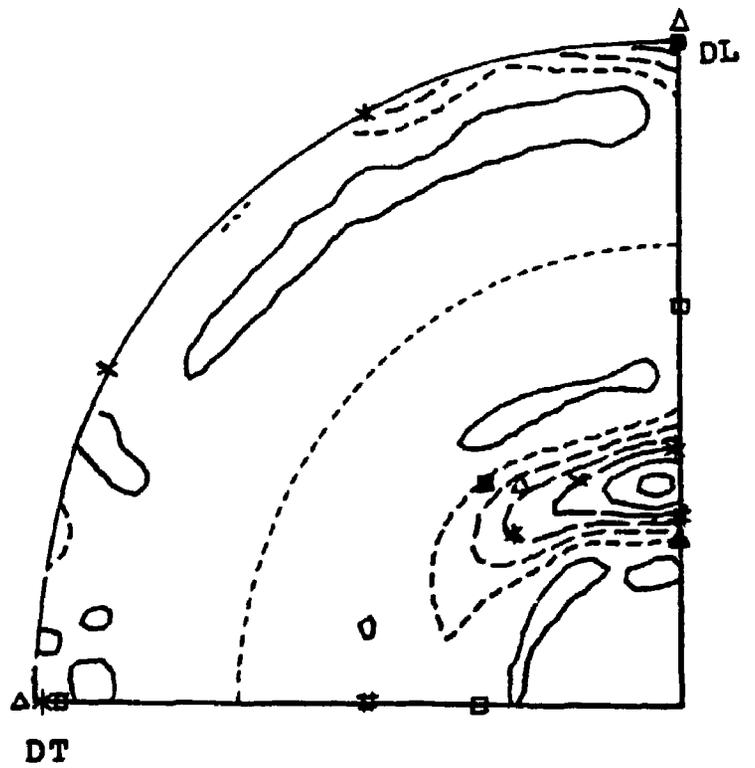
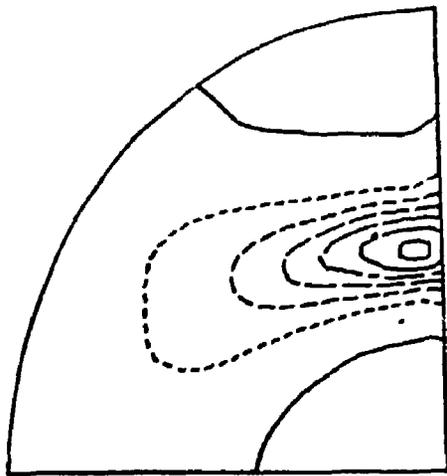
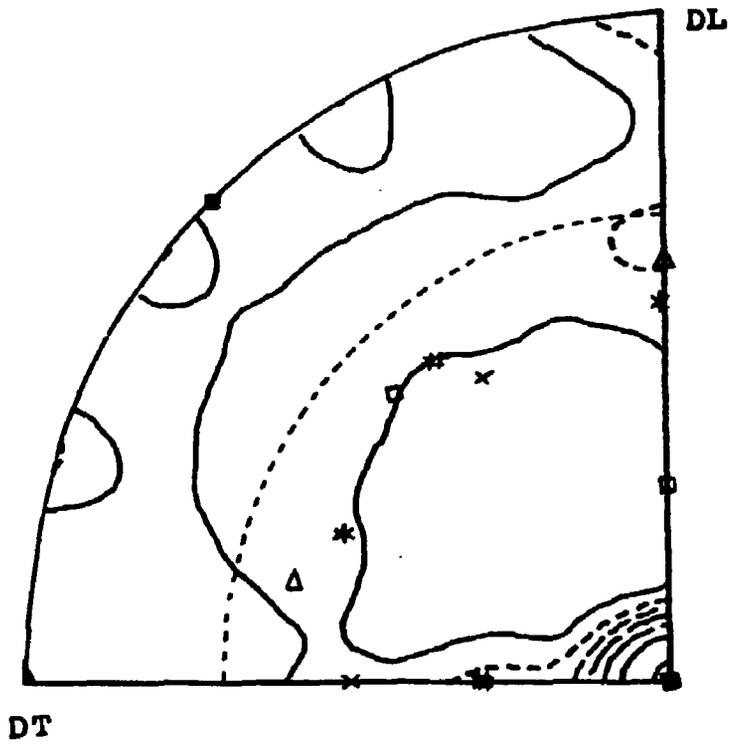
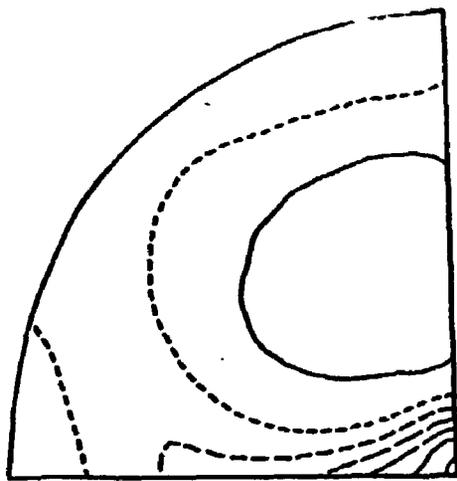


FIGURA IV.19 - Figuras de polo (200) e (220) completas e incompletas da amostra F-71.  
 ■  $\{001\}\langle 110\rangle$ ;  $\Delta$   $\{332\}\langle \bar{1}\bar{1}3\rangle$ ; #  $\{112\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ ; x  $\{111\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ ;  
 □  $\{112\}\langle 1\bar{1}1\rangle$

onde se verifica a presença da orientação  $\{111\}\langle 112\rangle$  ( $\varphi_1=40^\circ$ ,  $\Phi=63^\circ$ ,  $\varphi_2=45^\circ$ ) muito intensa, além das orientações,  $\{001\}\langle 110\rangle$  ( $\varphi_1=45^\circ$ ,  $\Phi=0^\circ$ ,  $\varphi_2=0^\circ$ ),  $\{112\}\langle 1\bar{1}0\rangle$  ( $\varphi_1=0^\circ$ ,  $\Phi=36^\circ$ ,  $\varphi_2=45^\circ$ ) e  $\{332\}\langle \bar{1}\bar{1}3\rangle$  ( $\varphi_1=23^\circ$ ,  $\Phi=50^\circ$ ,  $\varphi_2=55^\circ$ ), o que é confirmado pelo índice J de textura (vide Tabela IV.2).

Amostra	Índice J
A-71	126
A-60	145
F-71	99
F-60	60

Tabela IV.2 - Índice J de textura das amostras de aço

As componentes da textura de laminação do aço ferrítico estão localizadas ao longo de três linhas de orientação, conhecidas como fibras:  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\epsilon$ , que são obtidas na seção  $\varphi_2=45^\circ$ . Estas fibras contêm grãos com orientações  $\langle 110\rangle$  e  $\langle 111\rangle$  paralelas às direções de laminação e normal respectivamente. Para se distinguir as fibras  $\alpha$  e  $\gamma$  das fases  $\alpha$  e  $\gamma$ , designa-se as fibras  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\epsilon$  por fibras RD, ND e TD, respectivamente. Nas Figuras IV.20 a IV.22 são mostradas as fibras RD, ND e TD das amostras de aço, onde estão detalhadas as orientações características de cada fibra.

#### IV.1.3.1 - Principais componentes ao longo da fibra RD

O valor de  $f(g)$  desta fibra é obtido ao longo de  $\Phi$  para  $\varphi_1=0^\circ$  e  $\varphi_2=45^\circ$ .

##### a) $\{001\}\langle 110\rangle$

Esta é uma componente de alta intensidade e é observada

em todas as amostras ( $\phi=0$ ). É uma componente cuja intensidade aumenta com a deformação.

b)  $\{112\}\langle 1\bar{1}0\rangle$

Esta é uma componente secundária em intensidade, observada em ( $\phi = 37^\circ$ ), apresentando-se mais intensa para os aços que sofreram transformação  $\gamma \longrightarrow \alpha'$  que para os puramente ferríticos. Mostra ser estável na faixa de deformação sofrida (60 a 71% de redução).

c)  $\{111\}\langle 1\bar{1}0\rangle$

Esta orientação ao longo da fibra RD ( $\phi = 52^\circ$ ) ocorre somente para as amostras laminadas a 60%.

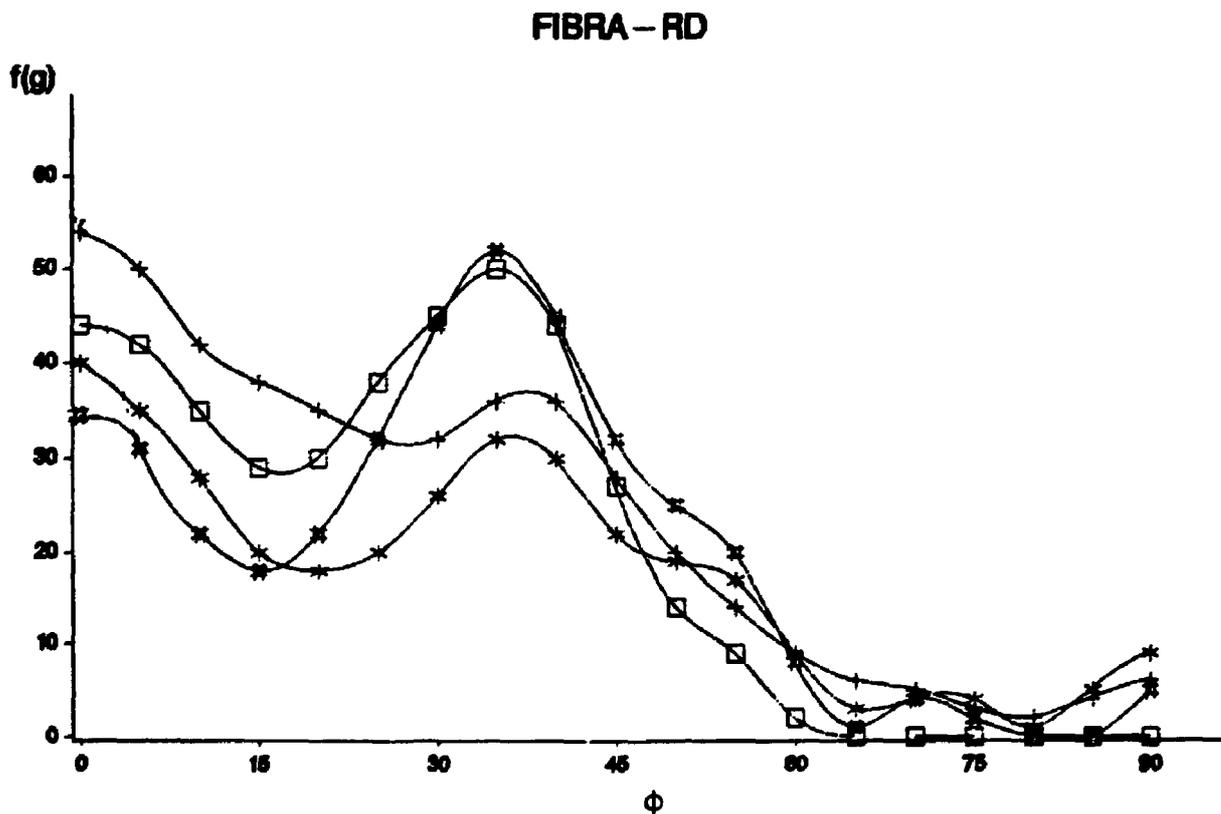


FIGURA IV.20 - Função distribuição de orientações ao longo da fibra-RD. Os símbolos designam as amostras:  
 + F-71; \* F-60; □ A-71; # A-60

#### IV.1.3.2 - Principais componentes ao longo da fibra RD

Ao longo desta fibra, obtida em função de  $\varphi_1$ , para  $\Phi = 55^\circ$  e  $\varphi_2 = 45^\circ$  somente uma componente mostra ser importante, a orientação  $\{111\}\langle 11\bar{2}\rangle$ .

##### a) $\{111\}\langle 11\bar{2}\rangle$

Investigações experimentais anteriores indicam que a orientação  $\{111\}\langle 11\bar{2}\rangle$ , ( $\varphi_1 = 30^\circ$  e em  $\varphi_1 = 90^\circ$ ), é formada durante a deformação e que tende a desaparecer com o aumento da redução <sup>(45)</sup>.

Estas observações são condizentes com os resultados obtidos neste trabalho para as duas amostras, sendo que esta orientação é pouco significativa para a amostra de aço ferrítico 71%, e possui um valor máximo para a amostra de aço austenítico 60%.

#### IV.1.3.3 - Principais componentes ao longo da fibra TD

O valor de  $f(g)$  desta fibra é obtido ao longo de  $\Phi$ , para  $\varphi_1 = 90^\circ$  e  $\varphi_2 = 45^\circ$ .

Ao longo da fibra TD existem várias orientações importantes, que devem ser citadas e que em sua maioria, confirmam resultados anteriores.

##### a) $\{001\}\langle \bar{1}\bar{1}0\rangle$

Esta orientação já foi citada, pois aparece na fibra RD. Os resultados apresentados na fibra TD em  $\Phi = 0$  confirmam as observações feitas anteriormente.

##### b) $\{111\}\langle 11\bar{2}\rangle$

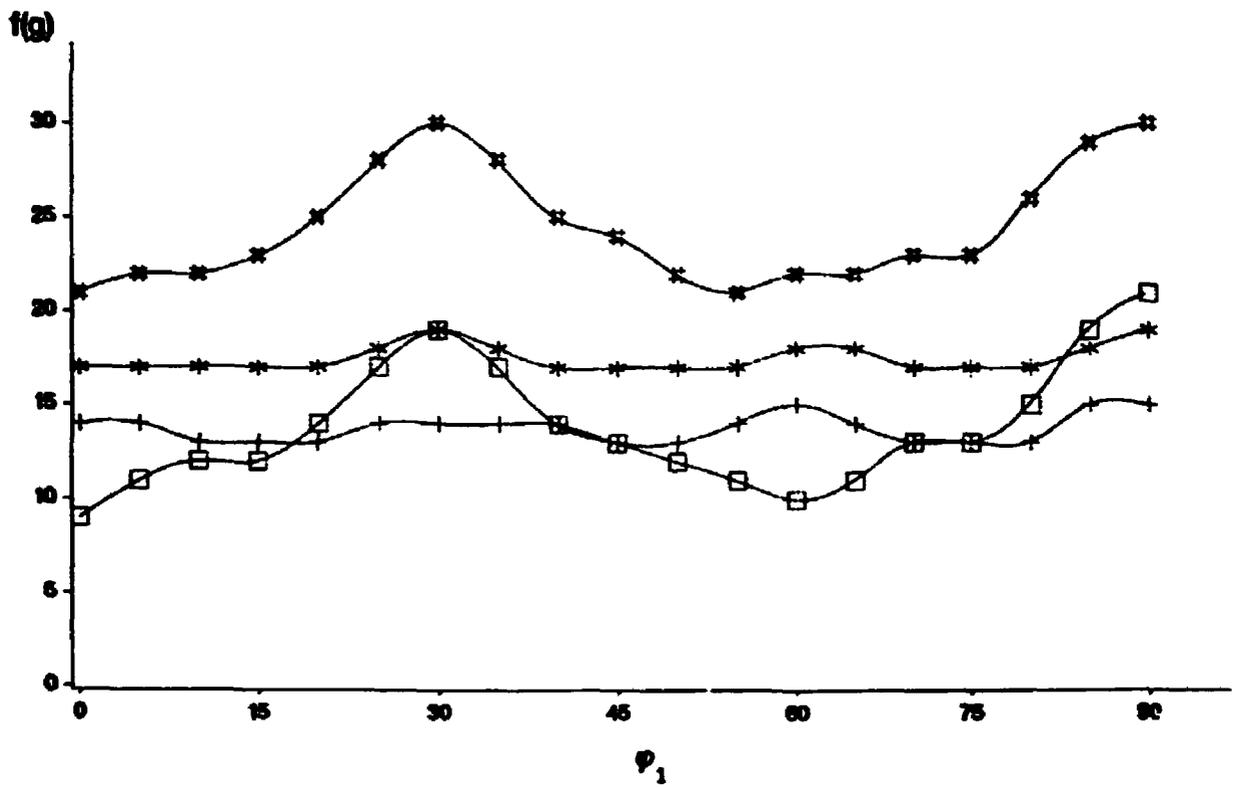


FIGURA IV.21 - Função distribuição de orientações ao longo da fibra-ND. Os símbolos designam as amostras:  
 + F-71; \* F-60; □ A-71; # A-60

FIBRA-TD

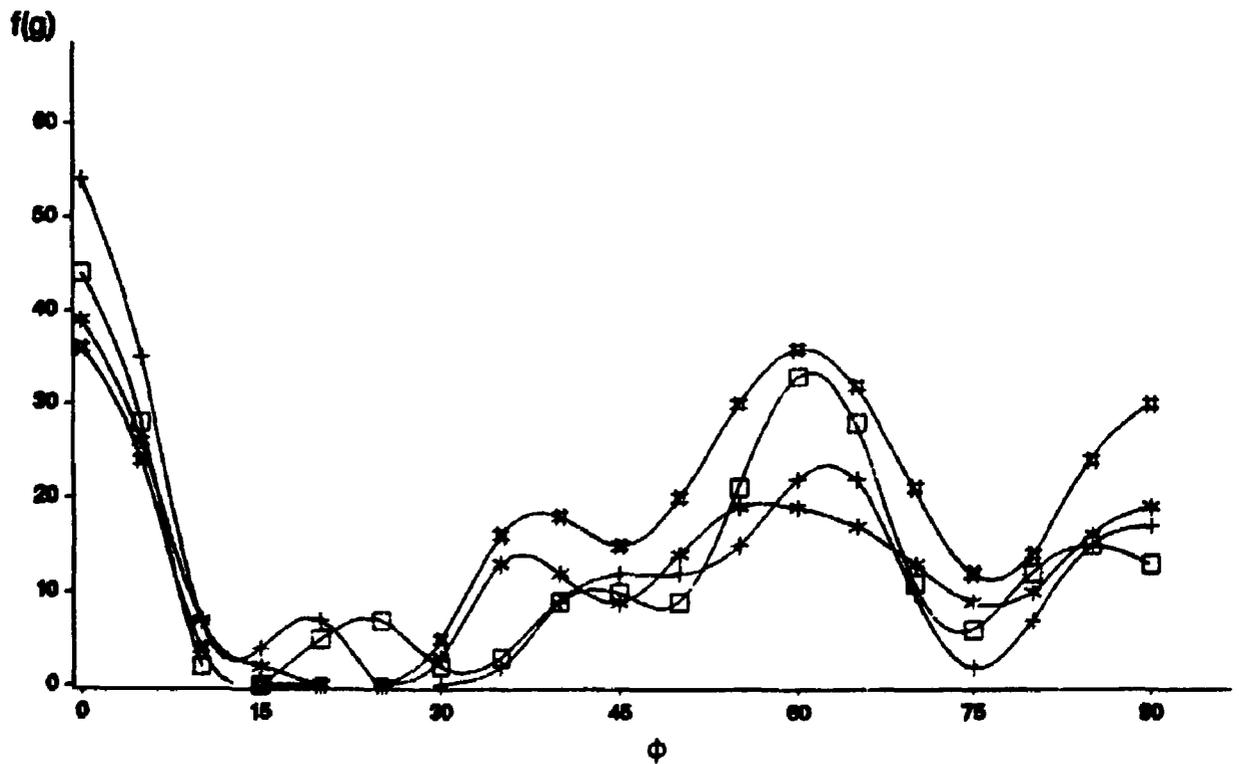


FIGURA IV.22 - Função distribuição de orientações ao longo da fibra-TD. Os símbolos designam as amostras:  
 + F-71; \* F-60; □ A-71; # A-60

a fibra ND. Apenas pode-se adicionar aos comentários anteriores que, com o desaparecimento desta orientação em função do aumento do grau de redução para a amostra F-71, percebe-se com maior clareza a orientação  $\{332\}\langle 113 \rangle$  ( $\phi = 65^\circ$ ).

c)  $\{110\}\langle 001 \rangle$

Esta orientação ( $\phi = 90^\circ$ ) mostra ser dependente da deformação para as amostras A-71 e A-60, sendo sua intensidade inversamente proporcional à deformação.

d)  $\{112\}\langle 11\bar{1} \rangle$

Esta orientação ( $\phi = 34^\circ$ ) ocorre somente para as amostras laminadas a 60% (A-60 e F-60) desaparecendo para as amostras A-71 e F-71, laminadas a 71%.

#### IV.2 - AVALIAÇÃO DA TENSÃO RESIDUAL

Para a simulação por computador, para avaliação da influência da textura na curva  $d \times \sin^2 \psi$ , foram escolhidas algumas amostras. As amostras são: Al 1145-50, por possuir um baixo índice de textura ( $J = 22$ ), Al 1145-88 ( $J = 117$ ) e Cu ( $J = 196$ ), que possui alto índice. Todos estes materiais são de estrutura cfc e possuem praticamente as mesmas componentes de textura.

Para todas as simulações das amostras de alumínio e cobre, utilizou-se o plano cristalográfico (422), as tensões principais constantes e iguais a  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = -100$  MPa e variou-se as outras componentes dos tensores para  $\psi > 0$  e  $\psi < 0$ .

As constantes elásticas utilizadas foram as do material puro, isto é, para o cobre,  $s_{1111} = 14,93$ ;  $s_{1122} = -2,82$  e  $s_{1212} = 3,33$  ( $10^{-12} \text{ m}^2 \text{ N}^{-1}$ )<sup>(11)</sup> e para o alumínio,  $s_{1111} = 15,92$ ,  $s_{1122} = -5,77$  e  $s_{1212} = 8,87$  ( $10^{-12} \text{ m}^2 \text{ N}^{-1}$ )<sup>(13)</sup>.

Distancia  
interplanar  
(nm)

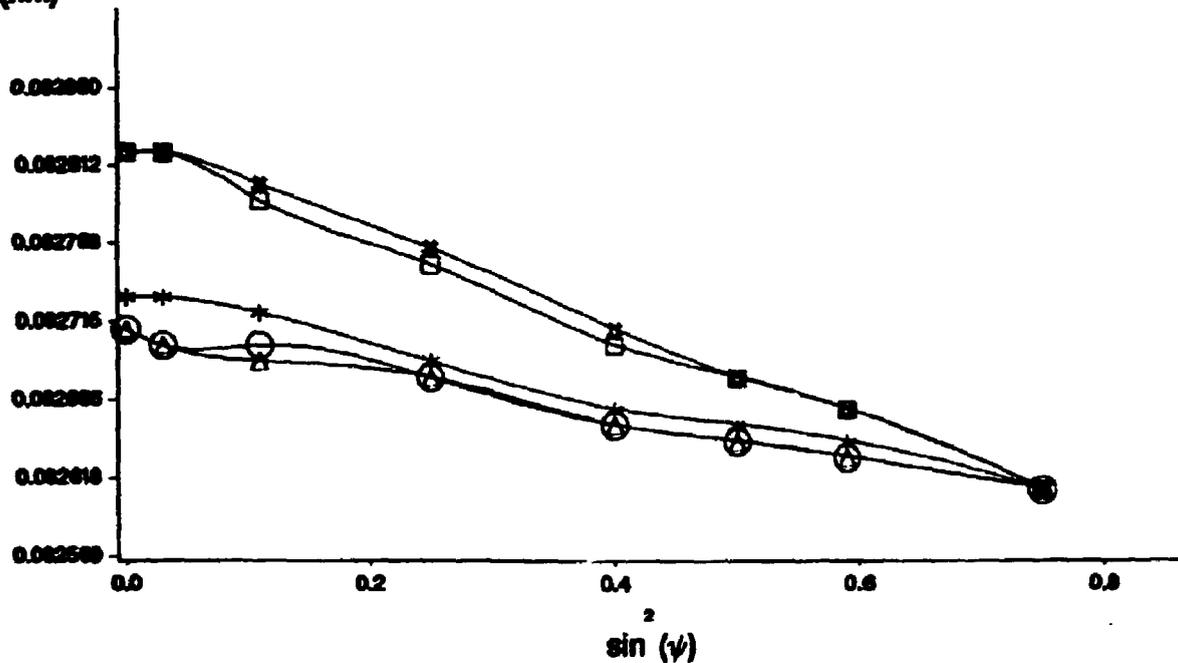


FIGURA IV.23 - Amostra Al 1145 50 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{33}$ : + 0 ; □ 80 ; ○ -20 (MPa) para  $\psi > 0$  e \* 0 ; # 80 ; △ -20 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

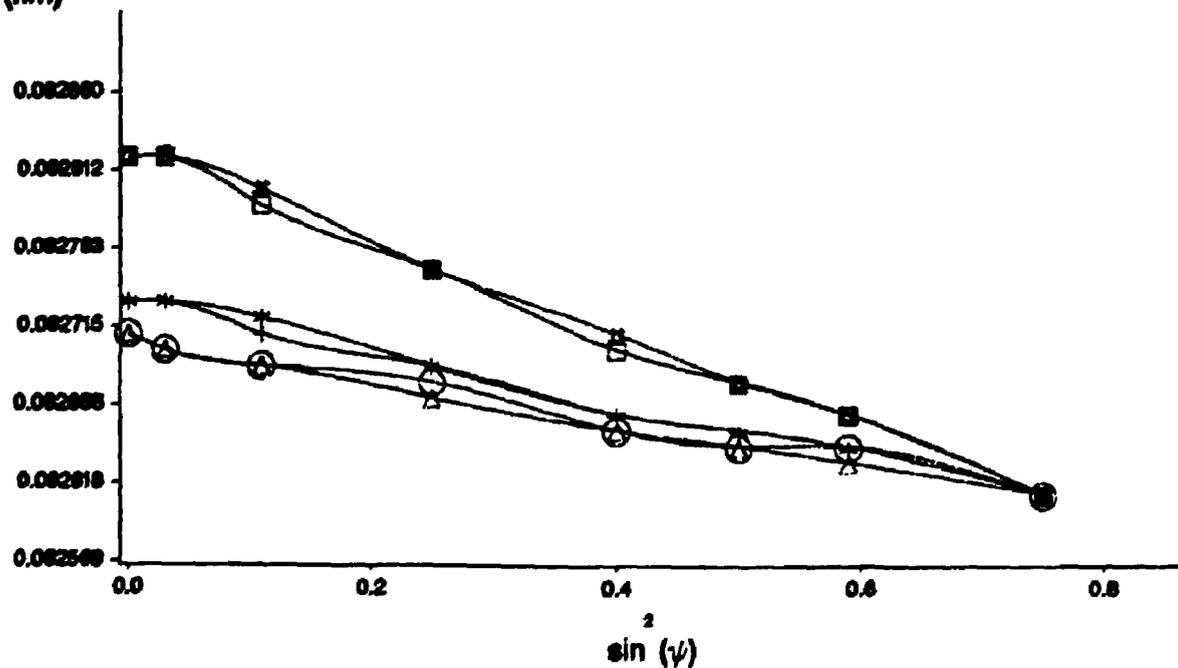


FIGURA IV.24 - Amostra Al 1145-88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{33}$ : + 0 ; □ 80 ; ○ -20 (MPa) para  $\psi > 0$  e \* 0 ; # 80 ; △ -20 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

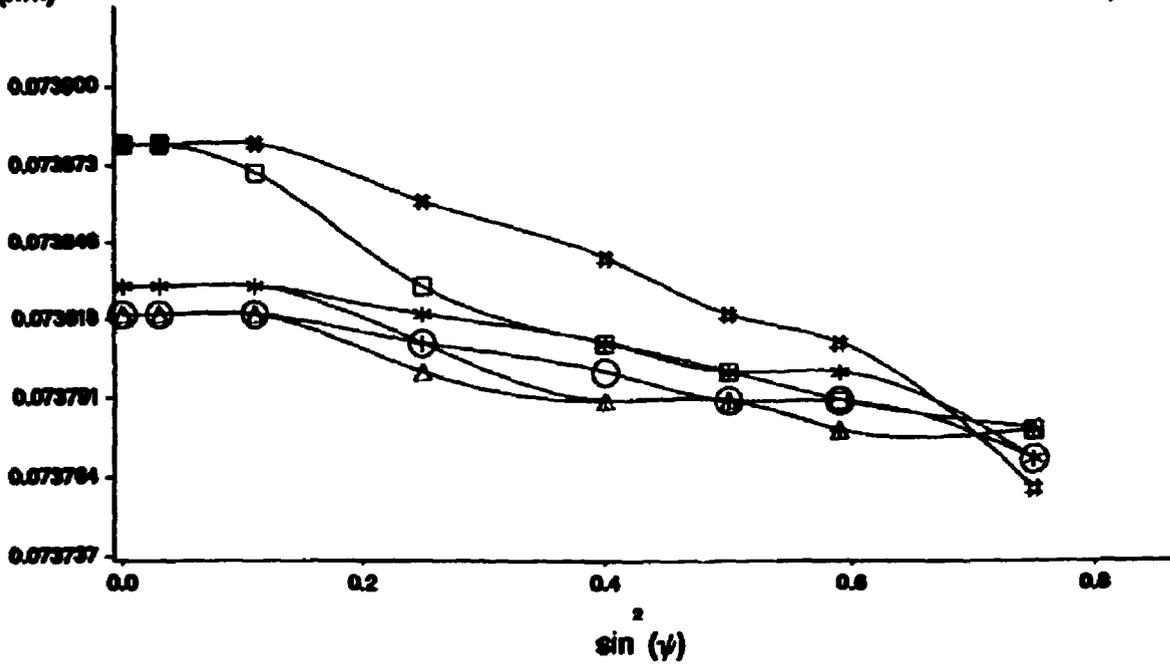


FIGURA IV.25 - Amostra a Cu-88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{33}$ : + 0 ; □ 80 ; ○ -20 (MPa) para  $\psi > 0$  e \* 0 ; # 80 ; Δ -20 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

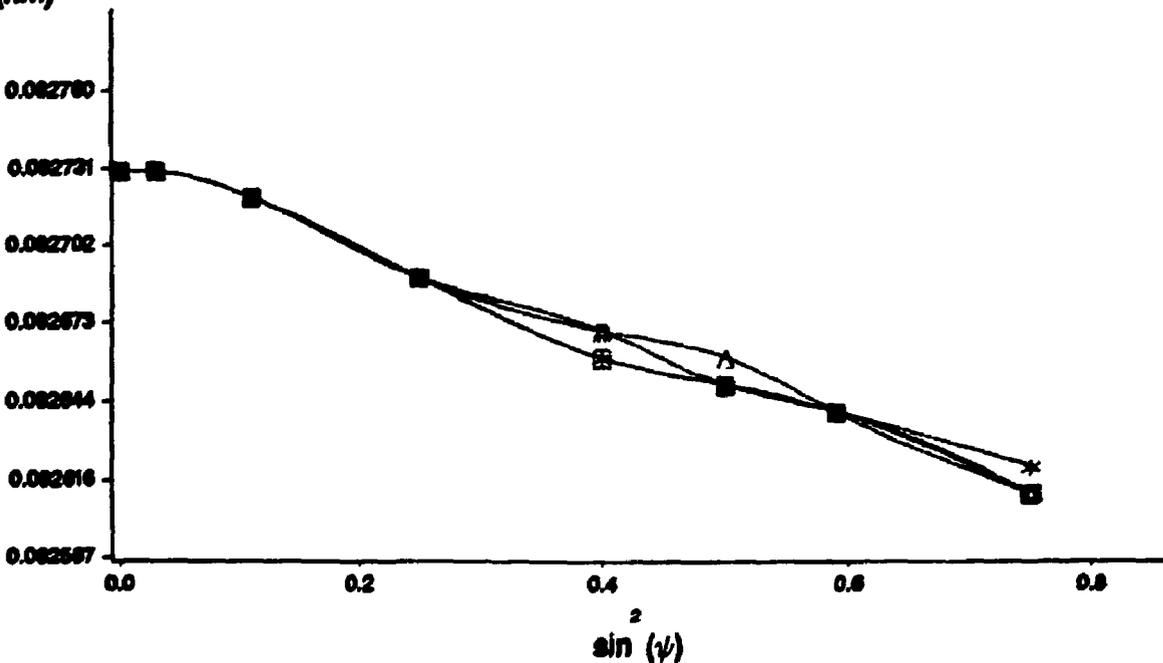


FIGURA IV.26 - Amostra Al 1145-50 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{12}$ : + 0 ; \* - 80 ; □ -40 ; # 40 Δ 80 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

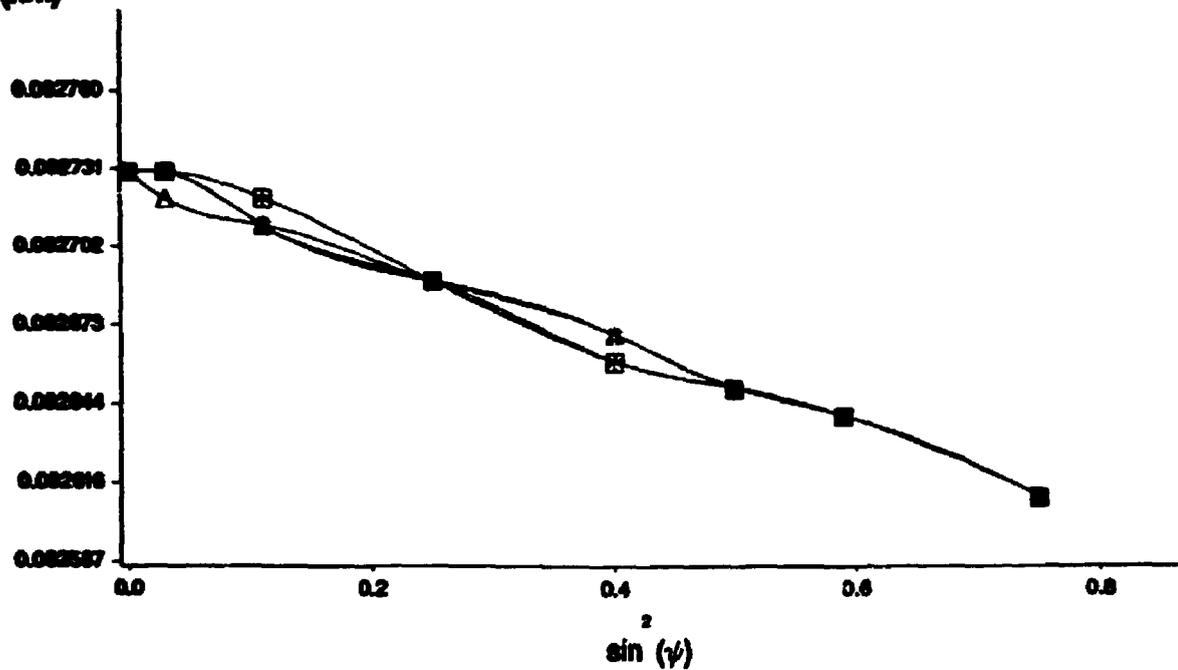


FIGURA IV.27 - Amostra Al 1145 88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{12}$  : + 0 ; \* - 80 ; □ -40 ; # 40  $\Delta$  80 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

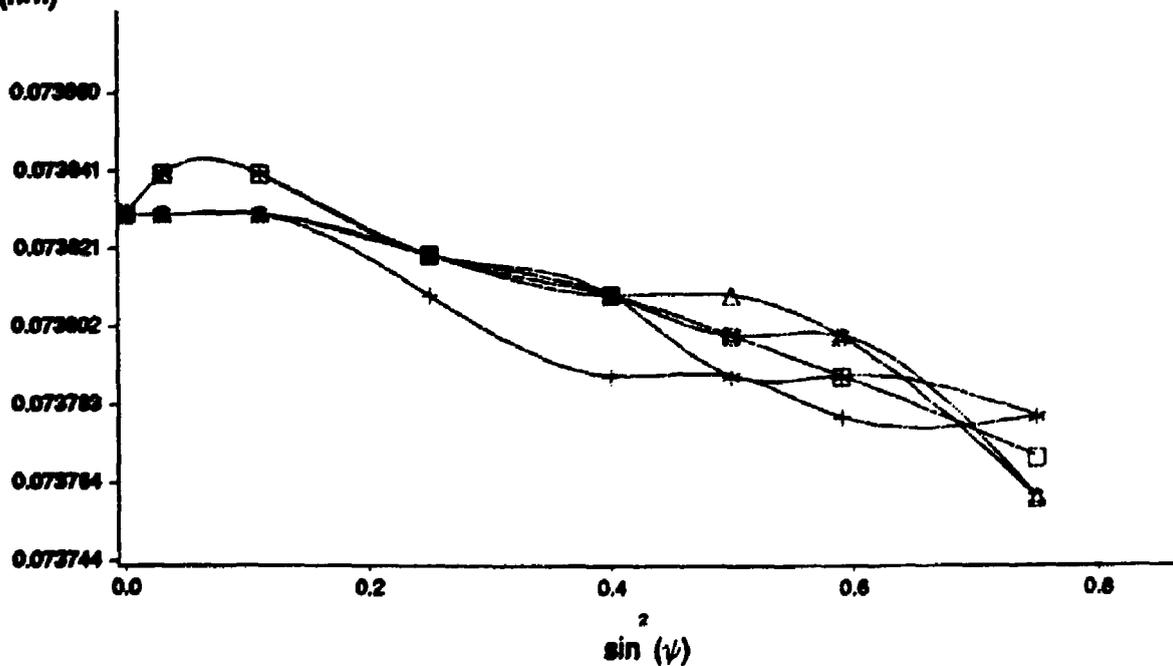


FIGURA IV.28 - Amostra a Cu 88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{12}$  : + 0 ; \* - 80 ; □ -40 ; # 40  $\Delta$  80 (MPa) para  $\psi < 0$

São apresentadas nas Figuras IV.23 a IV.25 as curvas  $d \times \sin^2\psi$ , variando a tensão normal de 80,0, -20 MPa para  $\psi > 0$  e  $\psi < 0$ . Verifica-se que quanto maior o índice J, maior é o grau de oscilações das curvas. Como previsto as tensões de compressão ( $\sigma_{33} < 0$ ), diminuem o valor de  $d_0$ . O "splitting" neste caso só ocorre para o cobre, independente de tensões de cisalhamento, devido ao seu alto grau de textura.

#### IV.2.2 - Tensão $\sigma_{12}$

As oscilações ocorrem tanto para  $\psi > 0$  quanto para  $\psi < 0$ , mas a variação da curva com o valor da tensão é sensível somente para  $\psi < 0$ . O "splitting" entre as curvas é muito pequeno e novamente, este efeito é maior para o cobre (vide Figuras IV.26 a IV.29).

#### IV.2.3 - Tensão $\sigma_{13}$

Esta componente de tensão é a responsável pelo "splitting" em materiais isotrópicos. No caso de materiais texturados, este comportamento é mantido, com uma oscilação adicional devida à textura. O comportamento em termos de oscilação mostrado nas curvas anteriores, é mantido aqui, ou seja, quanto maior o índice J, maior a oscilação da curva (Figuras IV.30 e IV.31).

#### IV.2.4 - Tensão $\sigma_{23}$

A variação da curva  $d \times \sin^2\psi$ , é pouco dependente do valor de  $\sigma_{23}$ , para baixos graus de textura, ao passo que para alto grau de textura, tem-se uma variação em  $d_0$ , que é inversamente

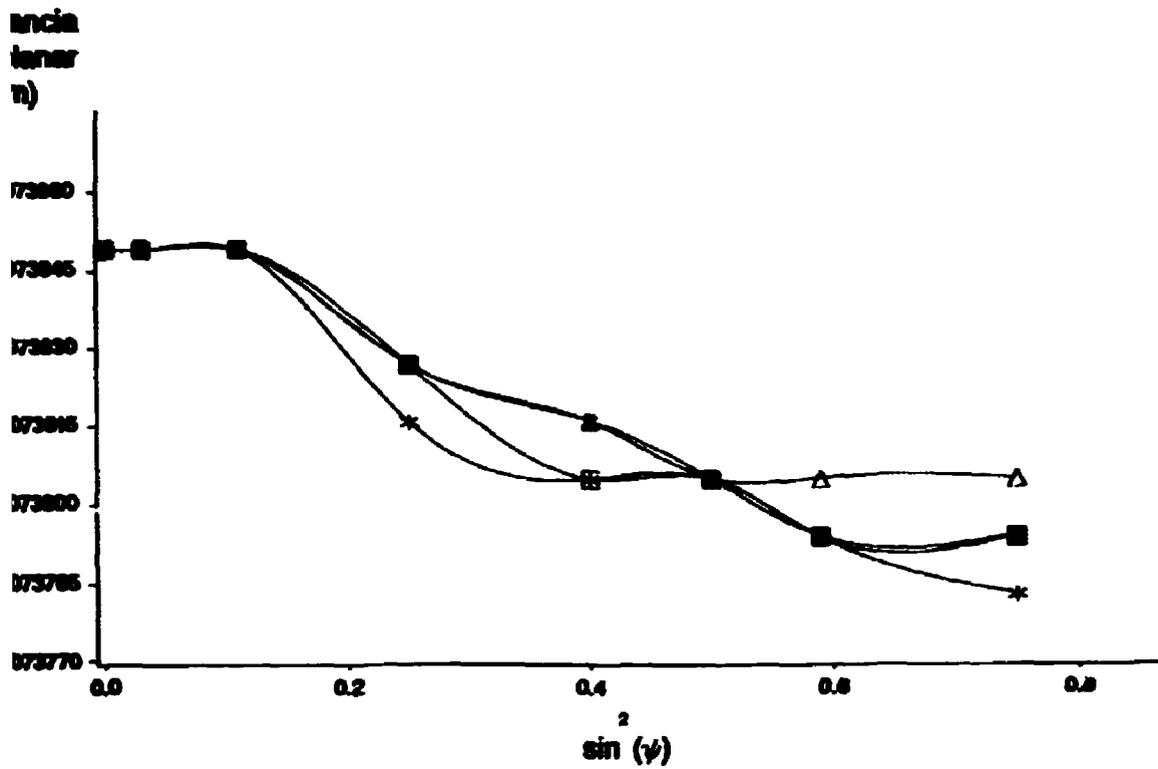


FIGURA IV.29 - Amostra a Cu 88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{12}$  : + 0 ; \* - 80 ; □ - 40 ; # 40  $\Delta$  80 (MPa) para  $\psi > 0$

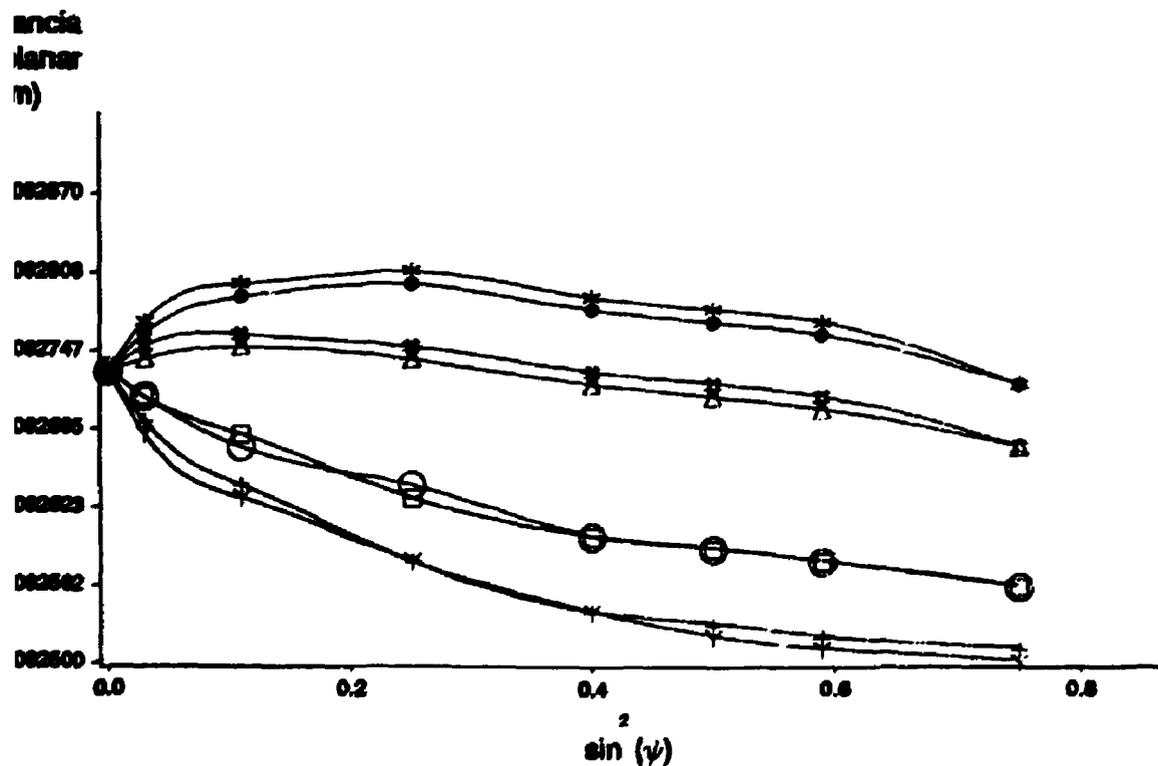


FIGURA IV.30 - Amostra Al 1145-88. Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{13}$  : + - 80; □ - 40; ○ 40; y 80 (MPa)  $\psi > 0$  \* - 80; # - 40; Δ 40; ● 80 (MPa)  $\psi < 0$

Distancia  
esférica  
(nm)

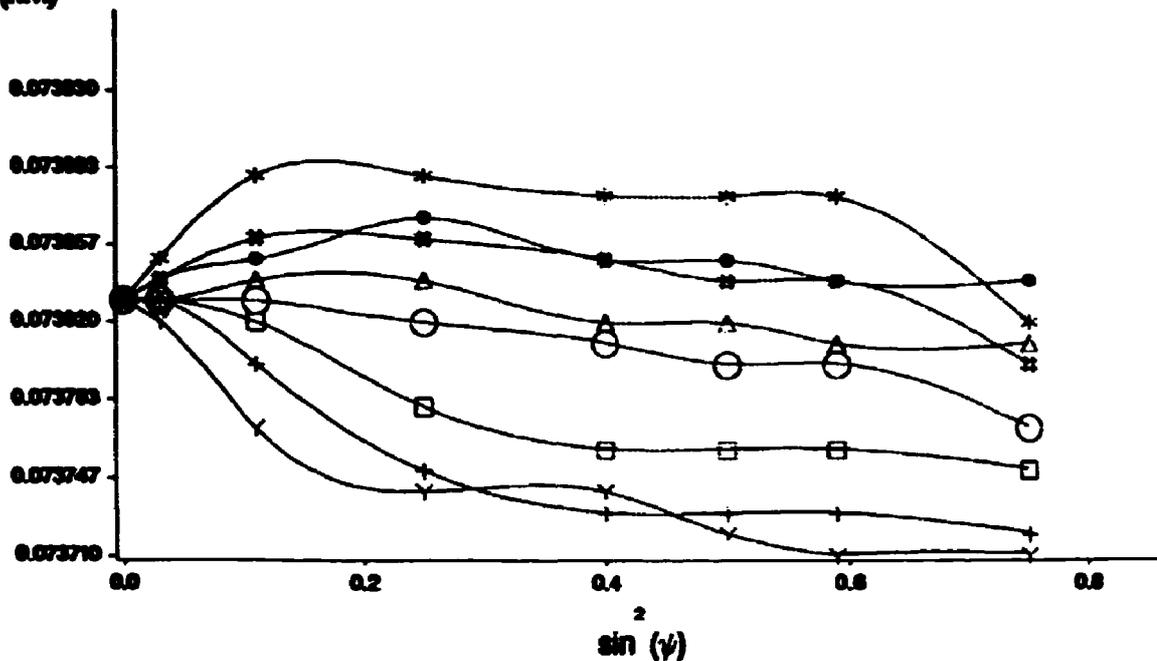


FIGURA IV.31 - Amostra Cu-88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{13}$ : + -80; □ -40; ○ 40; ▽ 80 (MPa)  $\psi > 0$   
\* -80; × -40; Δ 40; • 80 (MPa)  $\psi < 0$

Distancia  
esférica  
(nm)

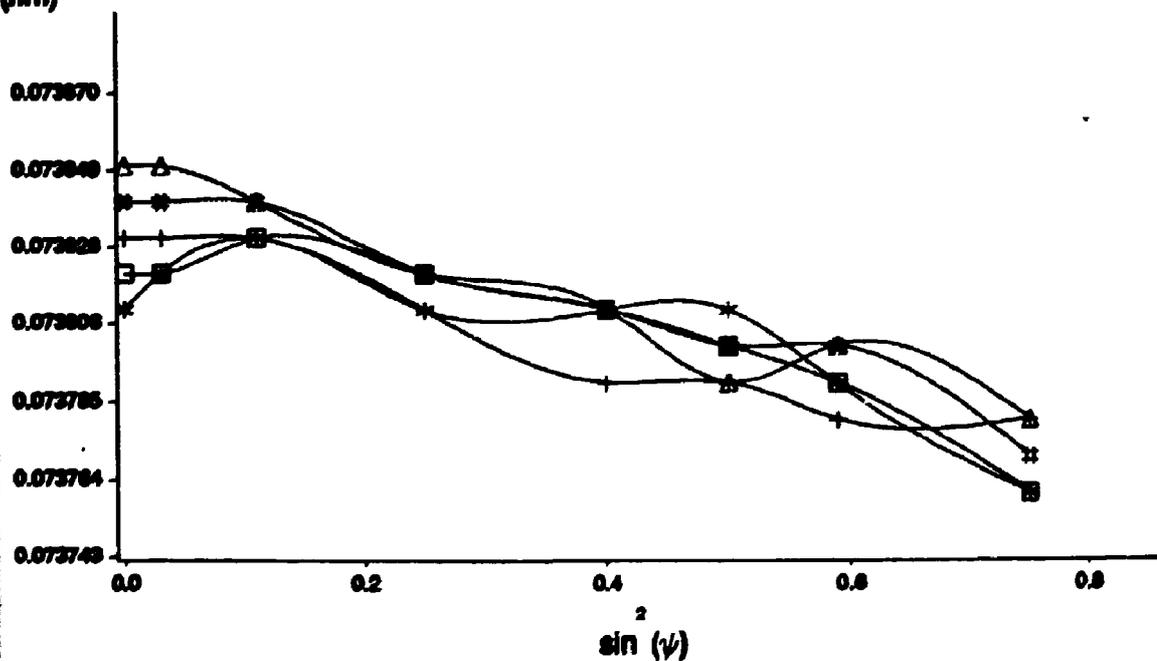


FIGURA IV.32 - Amostra Cu-88 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{23}$ : + 0 ; \* - 80 ; □ -40 ; ▽ 40  
Δ 80 (MPa) para  $\psi > 0$

proporcional a  $\sigma_{23}$  para  $\psi$  positivo e diretamente proporcional para  $\psi$  negativo (Figura IV.32).

### IV.3 - SIMULAÇÃO PARA OS AÇOS

Para as amostras de aço foram feitas simulações com o plano cristalográfico (211) e tensões principais  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = -300\text{MPa}$ . As constantes elásticas utilizadas foram as do ferro, isto é,  $s_{1111} = 7,57$ ,  $s_{1122} = -2,82$  e  $s_{1212} = 2,16$  ( $10^{-12} \text{ m}^2 \text{ N}^{-1}$ )<sup>(11)</sup>. Estas simulações serão apresentadas de acordo com seu interesse e em função de cada componente do tensor de tensão.

#### IV.3.1 - Tensão $\sigma_{33}$

A curva que apresenta maior oscilação é a da amostra A-60, que possui o maior índice J ( $J = 145$ ). A curva tem um máximo em  $\text{sen}^2\psi = 0,25$ , que também é função do grau de anisotropia e parece ser função da existência da orientação  $\{111\}\langle 112\rangle$ ,  $\{112\}\langle 1\bar{1}0\rangle$  e  $\{332\}\langle \bar{1}\bar{1}3\rangle$ . A alteração em  $d_o$ , com  $\sigma_{33}$ , não é afetada pela textura. As Figuras IV.33 e IV.34 mostram o comportamento destas curvas.

#### IV.3.2 - Tensão $\sigma_{12}$

Também para esta tensão é verificado um ponto de máximo em  $\text{sen}^2\psi = 0,25$ , sendo mais pronunciado para a amostra A-60. O  $\psi$  "splitting" praticamente não existe, como previsto para esta componente de tensão em materiais isotrópicos. Além disso, a influência do valor dessa tensão no comportamento das curvas também é pequeno.

#### IV.3.3 - Tensão $\sigma_{13}$

Todas as curvas tem um comportamento muito parecido. Para todas as amostras as curvas com  $\psi > 0$  e  $\sigma_{13} < 0$  são muito

Distancia  
interplanar  
(nm)

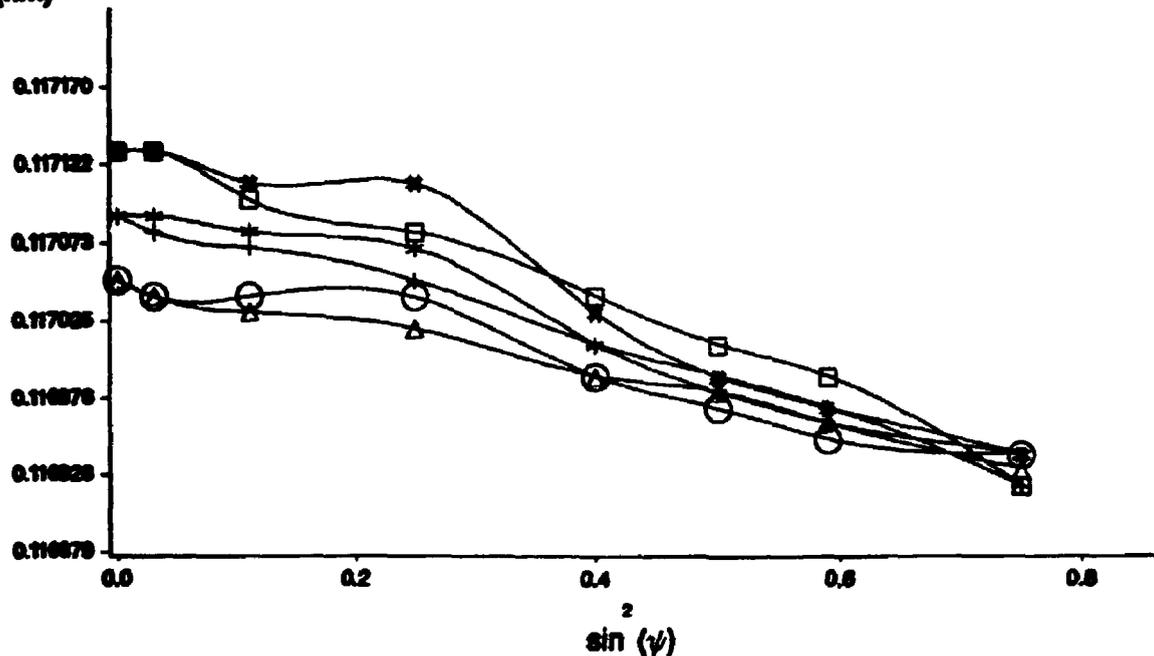


FIGURA IV.33 - Amostra a A-60 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{33}$ : + 0 ; □ 80 ; ○ -20 (MPa) para  $\psi > 0$  e \* 0 ; † 80 ; △ -20 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

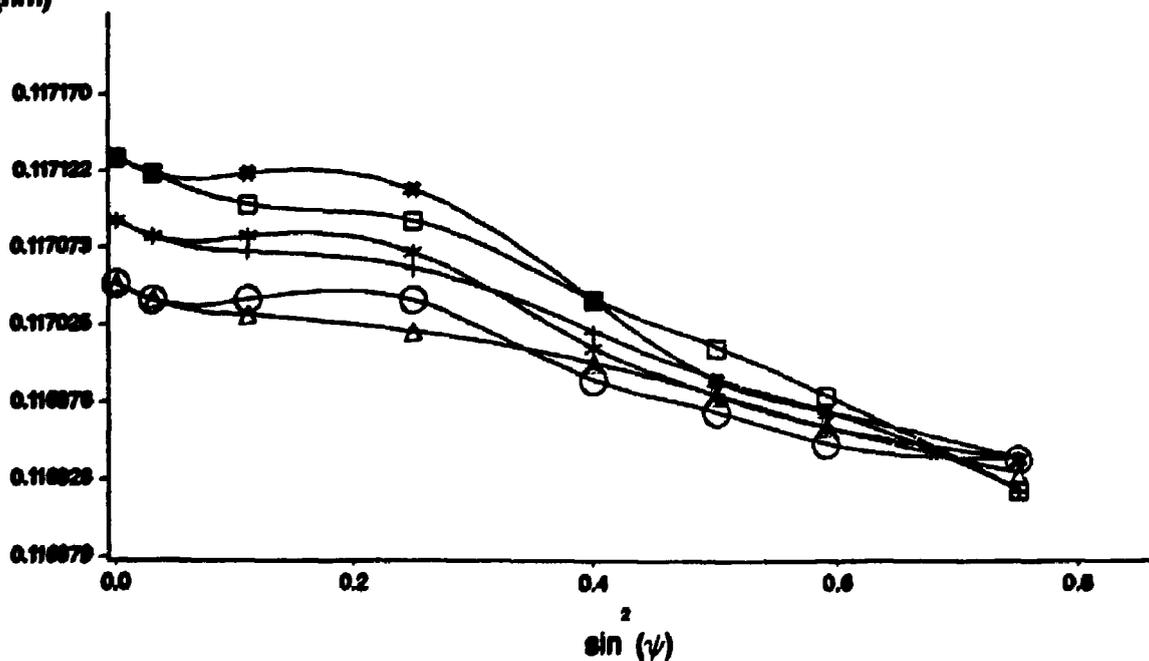


FIGURA IV.34 - Amostra F-71 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{33}$ : + 0 ; □ 80 ; ○ -20 (MPa) para  $\psi > 0$  e \* 0 ; † 80 ; △ -20 (MPa) para  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

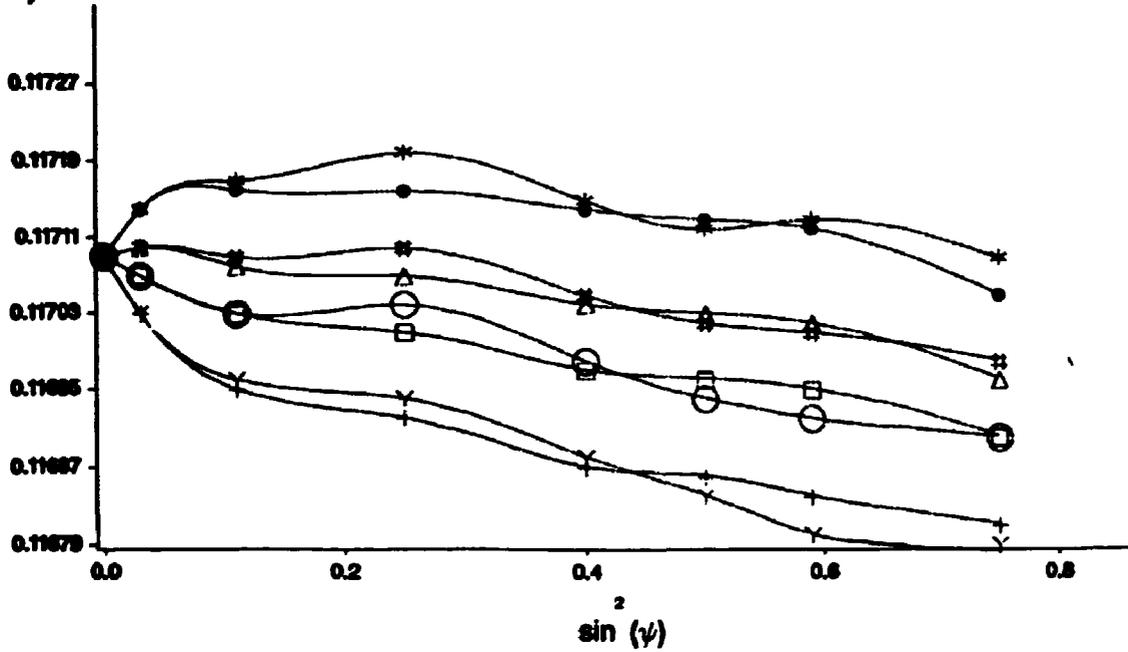


FIGURA IV.35 - Amostra A-60 . Os símbolos designam as tensões  $\sigma_{13}$ : + -80; □ -20; ○ 20; y 80 (MPa)  $\psi > 0$   
\* -80; # -20; Δ 20; ● 80 (MPa)  $\psi < 0$

Distancia  
interplanar  
(nm)

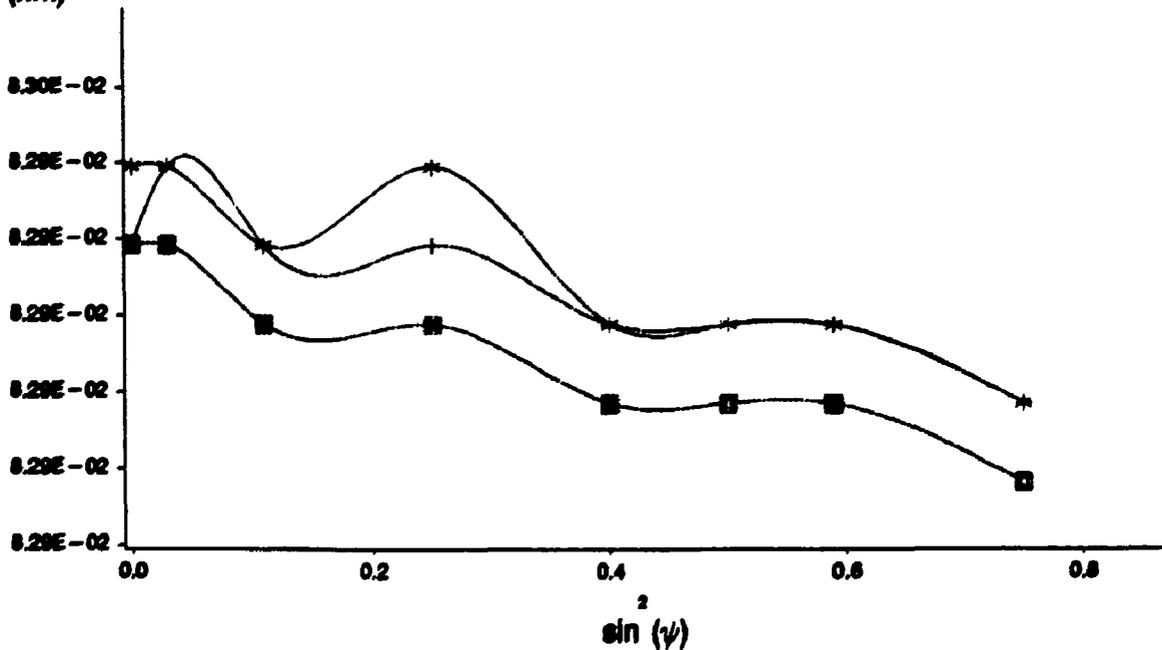


FIGURA IV.36 - Amostra Cu-88,  $\phi=0^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi > 0$  □  $\psi < 0$   
medido experimentalmente; \*  $\psi > 0$  #  $\psi < 0$

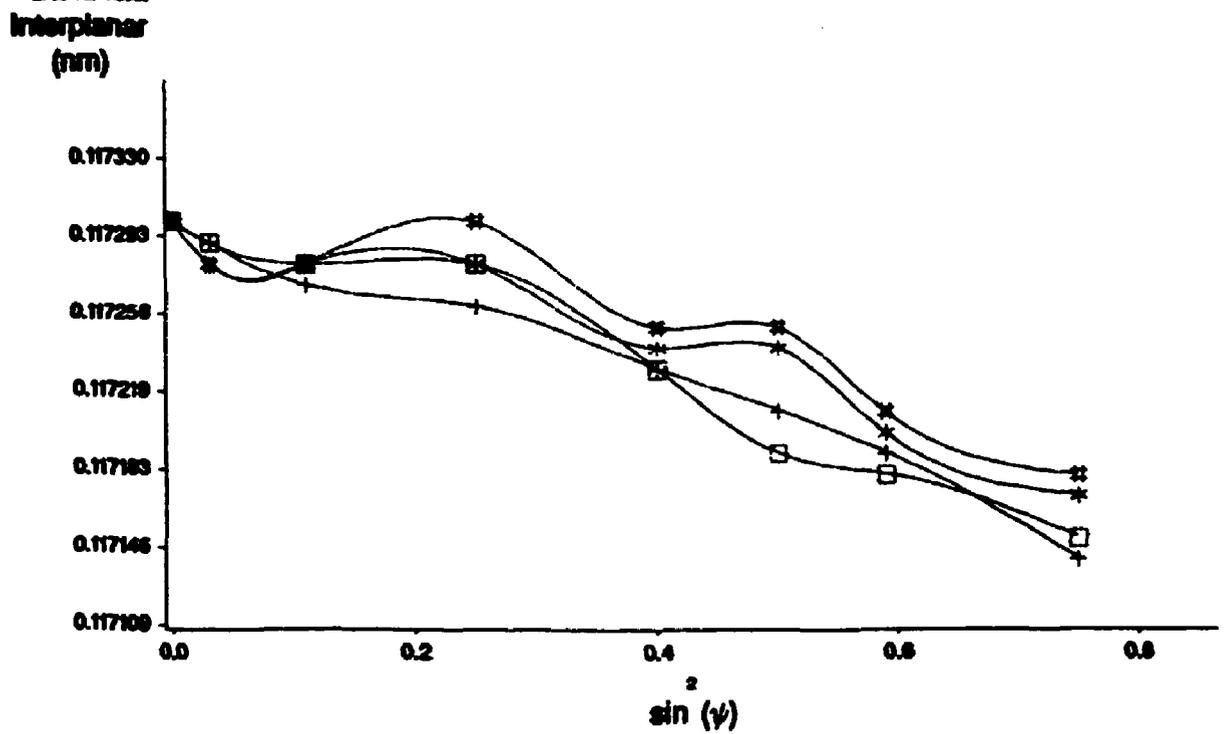


FIGURA IV.37 - Amostra F-60,  $\phi=0^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  □  $\psi<0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$  #  $\psi<0$

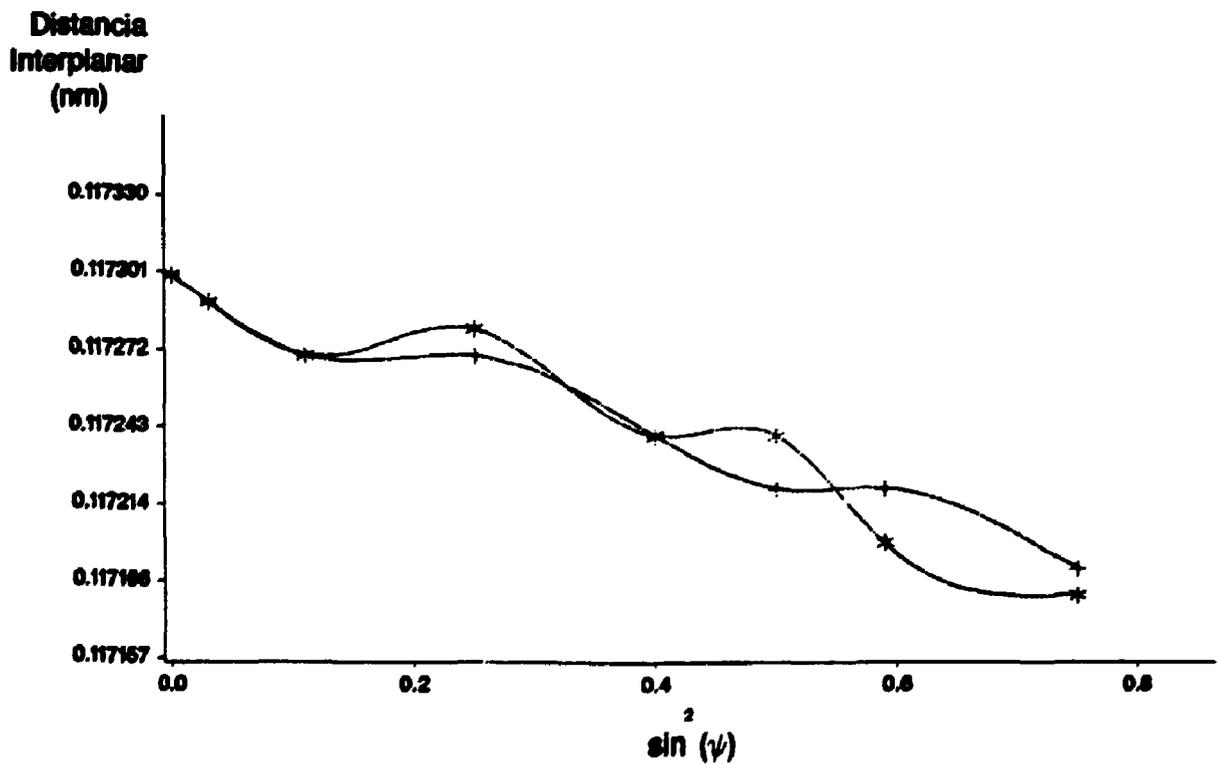


FIGURA IV.38 - Amostra F-60,  $\phi=45^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$

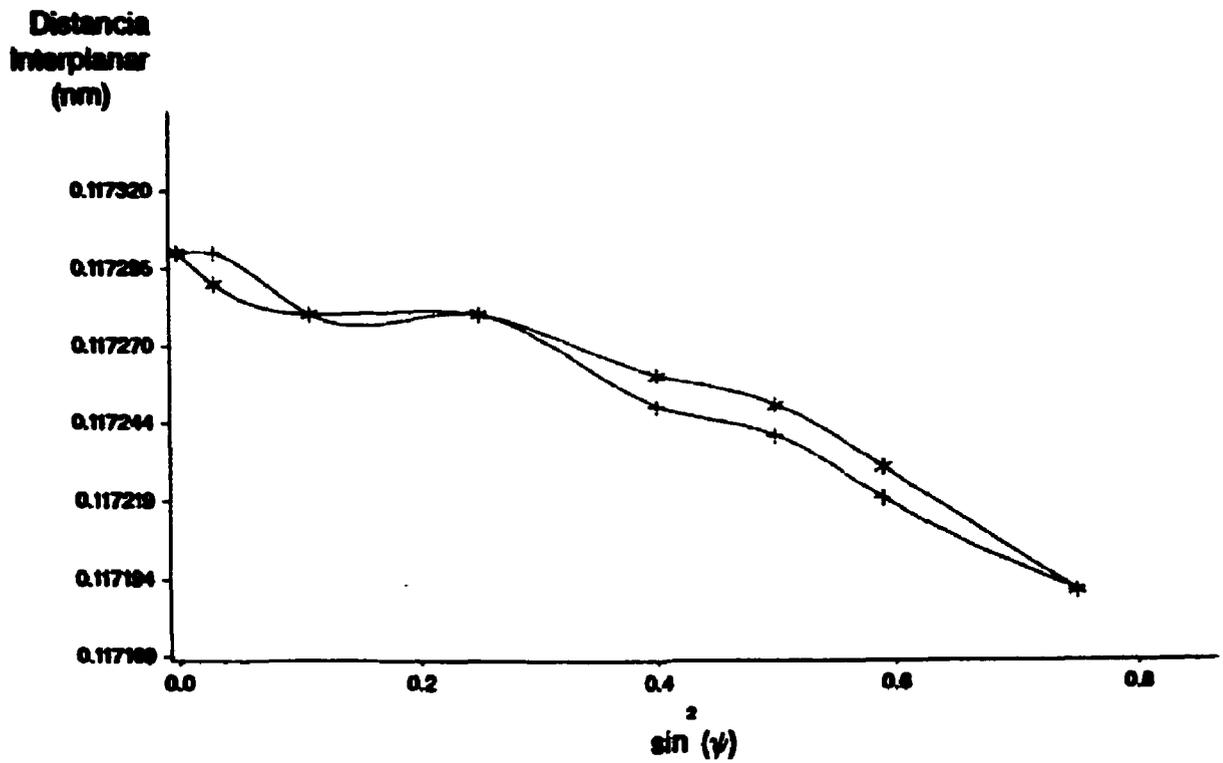


FIGURA IV.39 - Amostra F-60,  $\phi=90^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$

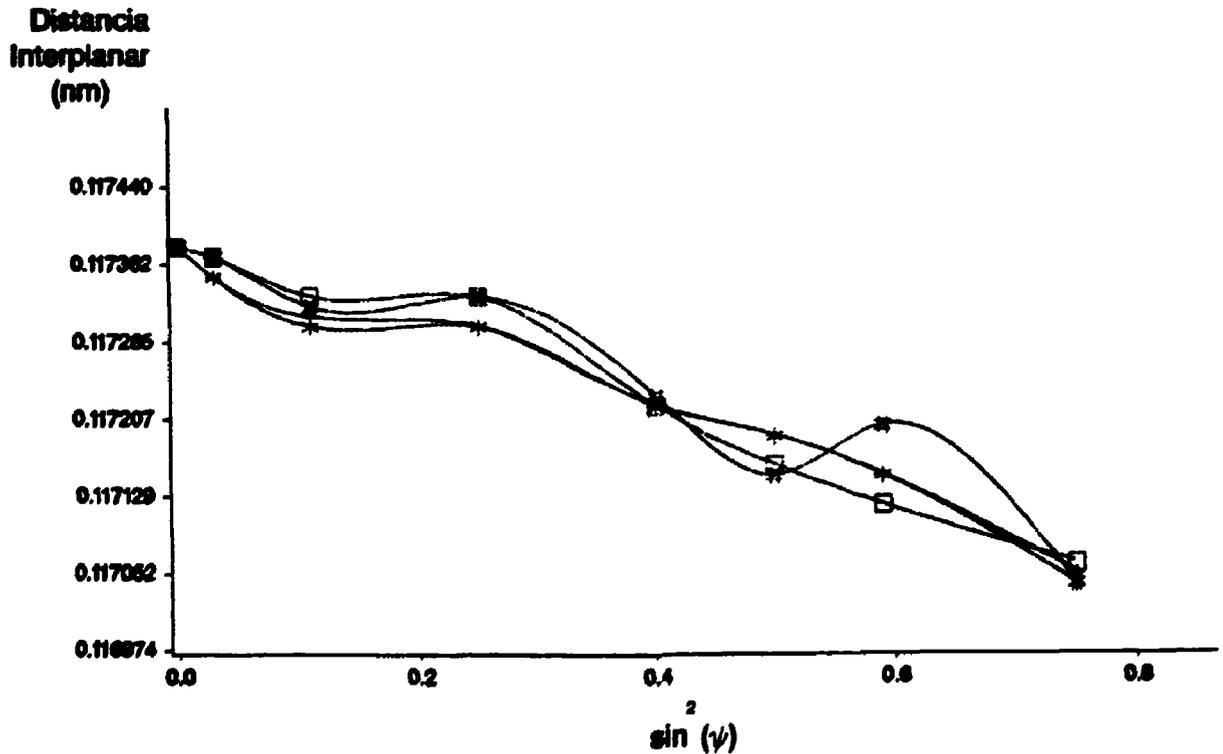


FIGURA IV.40 - Amostra F-71,  $\phi=0^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  □  $\psi<0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$  #  $\psi<0$

semelhantes àquelas com  $\psi < 0$  e  $\sigma_{13} < 0$  (Figura IV.35).

#### IV.3.4 - Tensão $\sigma_{23}$

O comportamento destas curvas é similar ao dos casos anteriores. Apenas um máximo se pronuncia em  $\text{sen}^2\psi = 0,25$ . Também não possui "splitting",  $d_0$  é inversamente proporcional a  $\sigma_{23}$  para  $\psi > 0$  e diretamente proporcional para  $\psi < 0$ .

A essência de todos estes fatos é que a tensão, em cada uma das suas componentes, em conjunto com a textura cristalográfica, conduz a uma curva não-linear para  $d \times \text{sen}^2\psi$ . Portanto é necessário comparar os resultados obtidos através de simulações teóricas com os resultados obtidos experimentalmente.

#### IV.4 - COMPARAÇÃO ENTRE OS DADOS EXPERIMENTAIS E TEÓRICOS

(A) Cu-88 - Para o cálculo teórico dos valores de  $d \times \text{sen}^2\psi$  do plano cristalográfico (331), usou-se o seguinte tensor de tensão:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -50 & -20 & 6 \\ -20 & -30 & 0 \\ 6 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

A Figura IV.36 mostra a curva experimental e a curva teórica para a amostra Cu-88. Os resultados mostram-se muito bons para  $\psi < 0$  e embora para  $\psi > 0$  a curva não tenha uma superposição perfeita, os pontos de máximo e mínimo coincidem.

(B) Aço 430 - Foram calculadas as curvas  $d \times \text{sen}^2\psi$  do plano (211) para as amostras F-71 e F-60, com os seguintes tensores de tensão:

i) para a amostra F-71, temos :

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -600 & -30 & 0 \\ -30 & -390 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

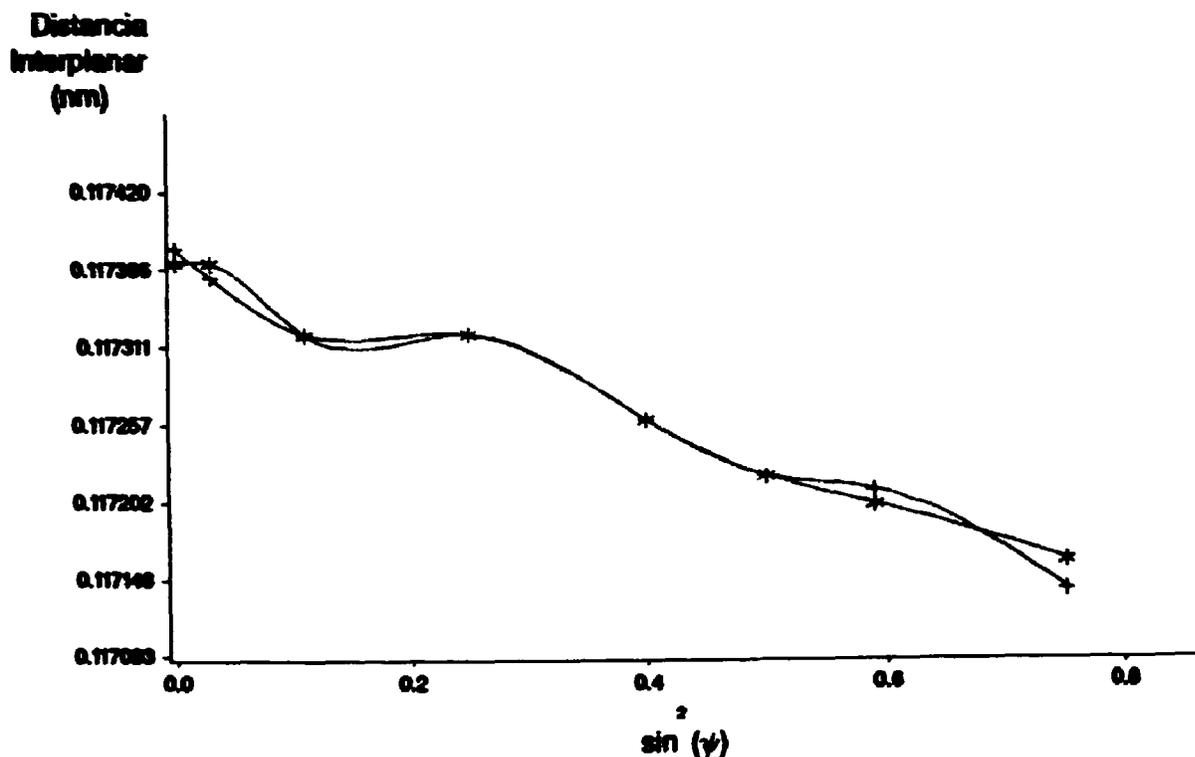


FIGURA IV.41 - Amostra F-71,  $\phi=45^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$

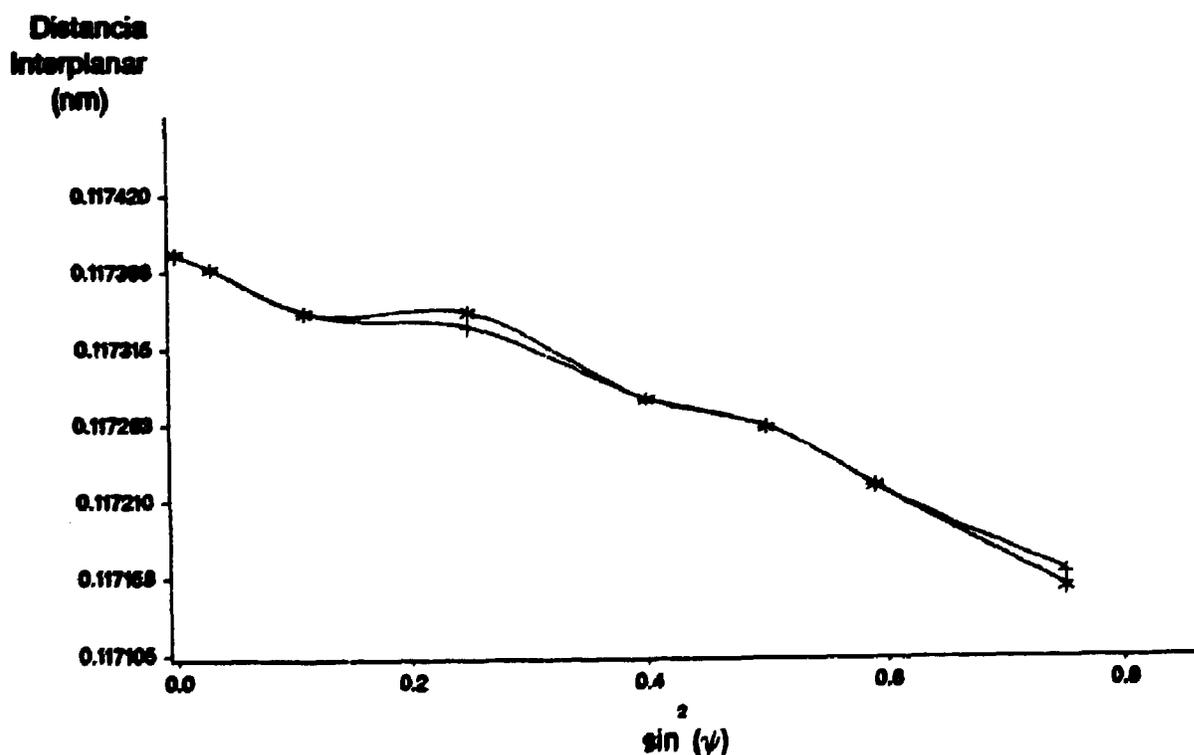


FIGURA IV.42 - Amostra F-71,  $\phi=90^\circ$  Os símbolos designam calculado teóricamente ; +  $\psi>0$  medido experimentalmente; \*  $\psi>0$

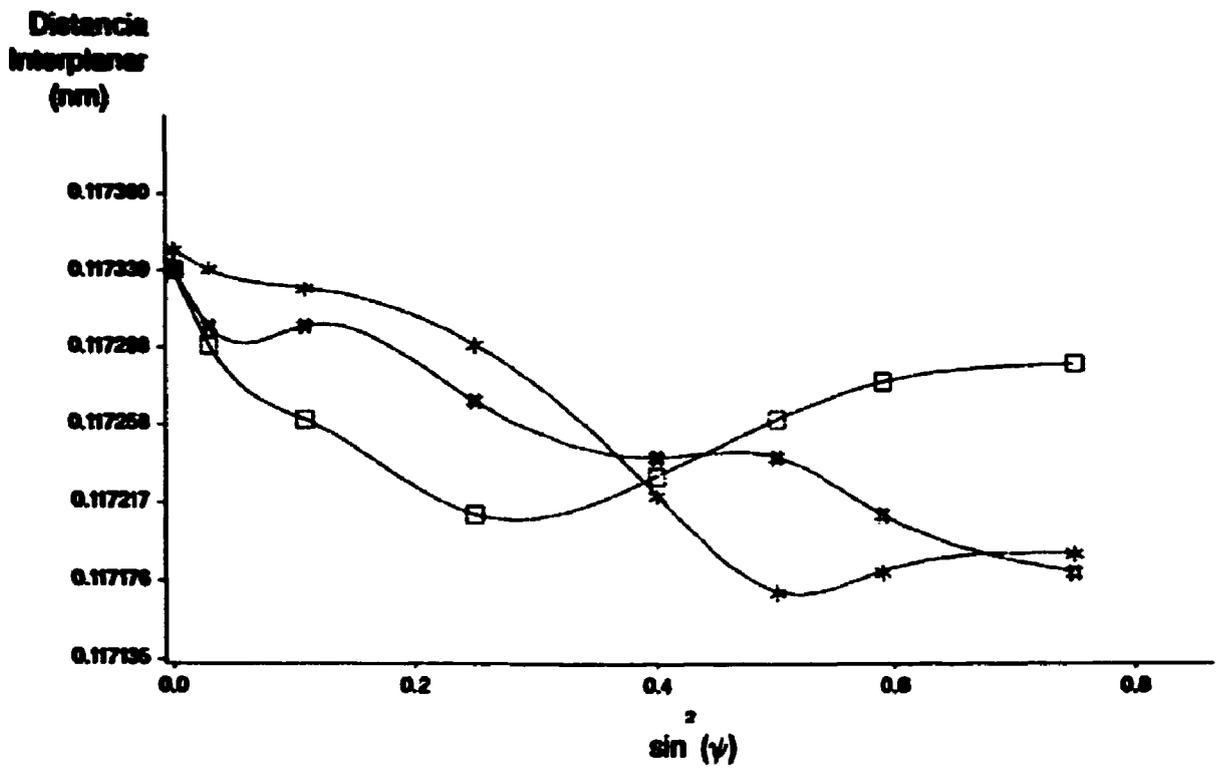


FIGURA IV.43 - Amostra A-60, Os símbolos designam  
 \*  $\phi=0^\circ$ ; □  $\phi=45^\circ$ ; #  $\phi=90^\circ$ ;  $\psi>0$

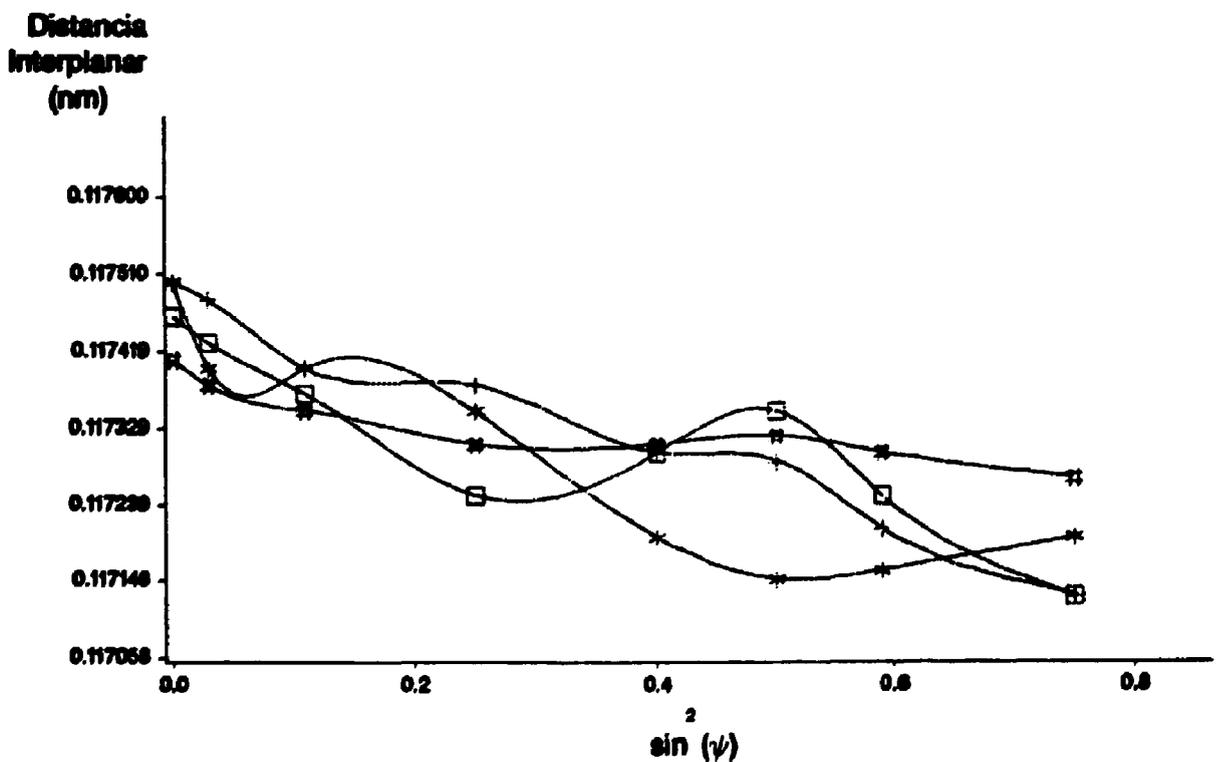


FIGURA IV.44 - Amostra A-71, Os símbolos designam  
 +  $\phi=0^\circ \psi<0^\circ$ ; \*  $\phi=0^\circ$ ; □  $\phi=45^\circ$ ; #  $\phi=90^\circ \psi>0^\circ$

ii) e para a amostra F-60, temos :

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -290 & -20 & 0 \\ -20 & -200 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A Figura IV.37 a IV.42 mostra o comportamento das curvas teóricas com as obtidas experimentalmente. Verifica-se que ambas possuem um ponto de máximo em  $\text{sen}^2\psi \sim 0,25$  e um de mínimo em  $\text{sen}^2\psi \sim 0,11$ . Vários pesquisadores que mediram tensão residual em aços ferríticos laminados a frio<sup>(3,7,46)</sup>, apesar das composições das ligas e dos graus de redução diferente, obtiveram esse mesmo comportamento. Um dos pontos em comum entre as amostras do presente trabalho com as destes autores é que todas apresentavam as mesmas componentes de textura de deformação.

(B) Aços -324 - As Figuras IV.43 e IV.44 mostram o comportamento das curvas obtidas experimentalmente para  $\phi = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ . Os gráficos obtidos por simulação nestas amostras apresentam o mesmo comportamento das curvas obtidas para o aço 430. Considerando que todas as simulações apresentavam um ponto de máximo em torno de  $\text{sen}^2\psi \sim 0,25$  e que para os valores experimentais estes pontos estão em outras posições, não foi possível obter nenhum resultado teórico que se assemelhasse a essas curvas. Um dos pontos falhos do programa de simulação é não levar em conta a tensão na região de acoplamento entre os grãos, mesmo porque não se tem uma teoria quantitativa desenvolvida para avaliar estas tensões. Mas qualitativamente sabe-se que na região de contorno pode ter regiões mais resistentes a deformação devido a orientação cristalográfica ou a outra fase. Neste caso específico os dois fatores contribuem para elevar os níveis de tensão no contornos, pois praticamente existe uma camada de material ccc sobreposta a uma camada de material cfc<sup>(35)</sup>, e que pela sua estrutura adquire um alto grau de textura quando deformado o que induz uma orientação muito intensa na camada ccc (vide índice J

para a amostra A-60). Portanto nestes casos a não linearidade não pode ser explicada apenas com textura e anisotropia das constantes elásticas, pois o nível de deformação induzida pelo acoplamento é da mesma ordem de grandeza.

## CAPÍTULO V - CONCLUSÕES

- O goniômetro de textura projetado e construído para o desenvolvimento deste trabalho, apresentou um desempenho perfeito.
- O programa desenvolvido neste trabalho para levantamento de figuras de polos completa e da função de distribuição de orientações a partir de figuras de polos incompletas mostrou-se bastante satisfatório.
- O tempo economizado e a facilidade de se obter experimentalmente figuras de polos incompletas pelo método da reflexão, em vez da completa ou mesmo da amostra composta, justifica seu uso.
- O programa EULER, desenvolvido neste trabalho, que associa a macro tensão  $\sigma_{ij}$  à fatores de textura e a anisotropia elástica dos monocristais, integrando a deformação sofrida por cada monocristal em função de sua relação de orientação com a tensão, nos fornece curvas que possuem comportamento similar ao observado em materiais monofásicos texturados.
- Para altas deformações, o uso da aproximação de Reuss leva a resultados satisfatórios na estimativa das constantes elásticas em função da orientação cristalográfica. Possivelmente esta eficiência é análoga à da teoria RC de Taylor para altas deformações<sup>(25,26,27)</sup>, o que sugere deformações plásticas heterogêneas para satisfazer a necessidade de continuidade entre os grãos, além disso a aproximação de Reuss é baseada em grãos alongados<sup>(12)</sup>, que são obtidos com alto grau de laminação<sup>(31)</sup> e sujeitos a tensão constante.
- Em materiais que apresentam mais de uma fase, o método por si só não explica a não linearidade observada devendo ser avaliadas as tensões devidas à interação entre grãos. Uma tentativa para se

avaliar estas interações é medir a curva  $d \times \sin^2\psi$  em planos do tipo (hhh) ou (h00), onde teoricamente a textura não causa oscilação no gráfico.

## REFERENCIAS-

- (01). DÖLLE, H.; COHEN, J.B.; Residual stresses in ground steels, *Metallurgical Transactions A*, 11-A:159-64, 1980.
- (02). HAUKE, V.M.; MACHERAUCH, E.; A useful guide for X-Ray stress evaluation (XSE), *Advances in X-Ray Analysis*, 27:81-99, 1984.
- (03). HAUKE, V.M.; Stress evaluation on materials having non-linear lattice strain distributions, *Advances in X-Ray Analysis*, 30: 101-20, 1987.
- (04). WAGNER, C.N.J.; EIGENMANN, B.; BOLDRICK, M.S.; The  $\phi$ -integral method for X-Ray residual stress measurements, *Advances in X-Ray Analysis*, 31:181-190, 1988.
- (05). MARION, R.H.; COHEN, J.B.; The need for experimentally determined X-ray elastic constants, *Advances in X-ray Analysis*, 20:355-367, 1977
- (06). NOYAN, I.C.; COHEN, J.B.; Determining stresses in the presence of nonlinearities in interplanar spacing vs.  $\sin^2\psi$ , *Advances in X-Ray Analysis*, 30:129-48, 1987.
- (07). MARION, R.H.; COHEN, J.B.; Anomalies in measurement of residual stress by X-ray diffraction, *Advances in X-Ray Analysis*, 18:466-501, 1975.
- (08). GAZZARA, C.P.; Direct X-Ray measurement of residual strains in textured steel, *Advances in X-Ray Analysis*, 28:197-206, 1985.
- (09). DÖLLE, H; The influence of multiaxial stress states, stress gradients and elastic anisotropy on the evaluation of (residual) stresses by X-rays, *J. Appl. Cryst.*, 12:489-501, 1979.

- (10). DÖLLE, H.; COHEN, J.B.; Evaluation of (residual) stresses in textured cubic metals, *Metallurgical Transactions A*, 11-A:831-36, 1980.
- (11). PENNING, P.; BRAKMAN, C.M.; The influence of texture on the strain measured by diffraction, *Acta Cryst.*, A44:157-63, 1988.
- (12) BUNGE, H.J.; Texture analysis in materials science - mathematical methods. -Butterworths/London (1982)
- (13). KITTEL C.; *Introduction to Solid State Physics* -John Wiley & Sons, Inc. 4nd /New York (1971).
- (14) BUNGE, H.J.;ESLING, C.; Quantitative texture analysis . Deutsche Gesellschaft für Metallkunde /Germany (1982)
- (15). SASAKI, T.; KURAMOTO, M.; X-Ray multiaxial stress analysis taking account of stress gradient, *Advances in X-Ray Analysis*, 30:121-128, 1987.
- (16). SASAKI, T.; KURAMOTO, M.; YOSHIOKA, Y.; A practical  $\phi$ -method for the stress on materials with stress gradient by X-Rays, *Advances in X-Ray Analysis*, 28:265-74, 1985.
- (17). YOSHIOKA, Y.; SASAKI, T.; KURAMOTO, M.; X-Ray multiaxial stress analysis on materials with stress gradient by use of  $\cos \psi$  function, *Advances in X-Ray Analysis*, 28:255-64, 1985.
- (18). HAUKE, V.M.; VAESSEN, G.J.H.; Residual stress evaluation with X-rays in steels having preferred orientation, *Metallurgical Transactions A*, 15-A:1407-14, 1984.
- (19). MACEWEN, S.R.; FABER JR., J.; TURNER, A.P.L.; The influence of texture on the interpretation of diffraction data to determine residual stress, *Scripta Metallurgica*, 18:629-33, 1984.

(20). BRAKMAN, C.M.; Residual stresses in cubic materials with orthorhombic or monoclinic specimen symmetry: influence of texture on  $\psi$  splitting and non-linear behaviour, *J. Appl. Cryst.*, 16:325-40, 1983.

(21). ARCE CH., A.R.; VIANA, C.S.C.; LORENTE, G.F.; Método automático de traçado de figuras de Pólo: Aplicação a um aço efervescente. Rio de Janeiro, Coordenação dos Programas de Pós-Graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, jun. 1972. (Publicação COPPE 7.72).

(22). LIMA, N.B.; PONTES, E.W.; MONTEIRO, P.R.B.; IMAKUMA, K.; Projeto e construção de um goniômetro automático de textura. In Congresso Brasileiro CBECIMAT: anais do 6º congresso de realizado no Rio de Janeiro, data. Rio de Janeiro, 1984 p.290-294.

(23) BUNGE, H.J.; PUCH, K.H.; Principles of texture goniometer measurements, *Z. Metallkde* 75(2):124-132, 1984.

(24). GELFAND I.M.; MINLOS R.A. and SHAPIRO Z.Ya.; Representation of the rotation and Lorentz groups and their application - Pergamon Press, Oxford, London/New York/Paris/-(1963)

(25 ). HIRSCH, J.; LÜCKE, K.; Mechanism of deformation and development of rolling textures in polycrystalline F.C.C. metals-II. Simulation and interpretation of experiments on the basis of Taylor-type theories, *Acta Metall.*, 36(11):2883-904, 1988.

(26). LEFFERS, T.; in HIRSCH, J.; LÜCKE, K.; Mechanism of deformation and development of rolling textures in polycrystalline F.C.C. metals-II. Simulation and interpretation of experiments on the basis of Taylor-type theories, *Acta Metall.*, 36(11):2883-904, 1988.

(27). TOTH, L.S.; JONAS, J.J.; DANIEL, D.; RAY, R.K.; Development of ferrite rolling textures in low- and extra low-carbon steels, *Metallurgical Transactions A*, 21-A:2985-3000, 1990.

(28) HIRSCH, J.; LÜCKE, K.; Mechanism of deformation and development of rolling textures in polycrystalline F.C.C. metals-I. Description of rolling texture development in homogeneous CuZn alloys, *Acta Metall.*, 36(11):2863-82, 1988.

(29). ALAM, R.; MINGELBERG, D.; LUCKE K.; *Z. Metallkde*, 58, 867(1967) in HIRSCH, J.; LÜCKE, K.; Mechanism of deformation and development of rolling textures in polycrystalline F.C.C. metals-I. Description of rolling texture development in homogenous CuZn alloys, *Acta Metall.*, 36(11):2863-82, 1988.

(30). GOODMAN S.R.; HU H.; *Trans A.I.M.E.* 230, 1413 (1964) in HIRSCH, J.; LÜCKE, K.; Mechanism of deformation and development of rolling textures in polycrystalline F.C.C. metals-I. Description of rolling texture development in homogeneous CuZn alloys, *Acta Metall.*, 36(11):2905-27, 1988.

(31). HANSEN, N.; Cold deformation microstructures, *Materials Science and Technology*, 6:1039-47, 1990.

(32). DILLAMORE, I.L.; The stacking fault energy dependence of the mechanisms of deformation in FCC metals, *Metallurgical Transactions*, 1:2463-70, 1970.

(33). CUYÁS, J.C.; CULCASI, J.D.; Inhomogeneity of rolling and annealing texture in aluminum, *Light Metal*, 12:12-15, 1988.

(34) RAPHANEL, J.L.; VAN HOUTTE, P.; Simulation of the rolling textures of B.C.C. metals by means of the relaxed Taylor theory, *Acta Metall.*, 33(8):1481-88, 1985.

(35). BOWKETT, M.W.; HARRIES, D.R.; Martensitic transformations in cold rolled En58B (type 321) austenitic stainless steel. Harwell, AERE Metallurgy Division, ap. 1978. (Pub.AERE-R-9093).

(36). RAY, R.K.; CHAPPELLIER, PH.; JONAS, J.J.; Correlations between the rolling textures in FCC Ni-Co alloys and the BCC transformation textures in controlled rolled steels, *Textures and Microstructures*, 12:141-53, 1990.

(37). SEETHARAMAN, V.; KRISHNAN, R.; Influence of the martensitic transformation on the deformation behaviour of an AISI 316 stainless steel at low temperatures, *Journal of Materials Science*, 16:523-30, 1981.

(38) SINGH, J.; Influence of deformation on the transformation of austenitic stainless steels, *Journal of Materials Science*, 20:3157-66, 1985.

(39). WARREN, B.E.; X-Ray Diffraction - Addison-Wesley (Addison-Wesley Series in Metallurgy and Materials)/London -(1969)

(40). Society of Automotive Engineers - Residual Stress Measurement by X-ray Diffraction - SAE 5784a, 2nd Ed. USA, 1980.

(41). LÜCKE, K.; ENGLER, O.; Effects of particles on development of microstructure and texture during rolling and recrystallisation in FCC alloys, *Materials Science and Technology*, 6:1113-30, 1990.

(42). SAS Institute Incorporation -Sas User's Guide: Basics-5nd version - USA, (1985).

(43). ARMSTRONG, P.E.; EASH, D.T.; O'ROURKE, J.A.; SMITH, J.F.; Separation and characterization of stress levels and texture in metal sheet and plate. II. Rolled copper sheet experiment, *Journal of Nondestructive Evaluation*, 6(1):33-45, 1987.

(44). CHEN, F.C.; LI, P.; CHU, S.L.; CHOU, C.P.; Evidence of strain-induced martensitic transformation in Fe-Mn-Al austenitic alloy steels at room temperature, *Scripta Metall. et Mater.*, 25:585-90, 1991.

(45). CHAPPELLIER, PH.; RAY, R.K.; JONAS, J.J.; Prediction of transformation textures in steels, *Acta Metall. Mater.*, 38(8):1475-90, 1990.

(46).HAUK, V.; Evaluation of macro- and micro-residual stresses on textured materials by X-Ray, neutron diffraction and deflection measurements, *Advances in X-Ray Analysis*, 29:1-15, 1986

(47).YOSHIOKA, Y.; MATSUI, H.; Residual stress analysis in steels having preferred orientation by use of synchrotron radiation source, *Advances in X-Ray Analysis*, 31:213-22, 1988.

APÉNDICE A

```

PROGRAM BIBLIOTECA
C BIBLIOTECA PARA ANALISE QUANTITATIVA DE TEXTURA
C COEFICIENTES DE SIMETRIA F(I,M,MU)
C COEFICIENTES DE FOURIER A'(I,M,S)
C COEFICIENTES DE FOURIER A''(I,M,N,S)
C FUNCOES DE LEGENDE E(I,M,II)
C FUNCOES HARMONICAS SIMETRIZADAS K(L,MU,HI)
DOUBLE PRECISION IQLMN(4046),TANG(2,12),DFP(16,3,9)
DOUBLE PRECISION FI,PI2,SI,CX,CI,CF,CF,C
DIMENSION BE(16,3,9),RES(73),XK(16,3,E),YF(17,12,12)
DIMENSION NOMB(16)
COMMON /PREM/ DCIPK, II, IPAX
COMMON /DEUS/ IEF
C ***** INDICES *****
DATA NOMB/1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/
C ***** ANGULOS FI F BETA HRL-EIXCS CRISTALOGRAFICOS *****
DATA TANG/0.157079632679490E01,0.00,0.157079632679490E01,
*0.785398163397448E0,0.955316618124509E0,0.785398163397448E0,
*0.463647609000806E0,0.00,0.615479708670387E0,0.785398163397448E0,
*0.841068670567930E0,0.110714871779409E01,0.321750554356642E0,
*0.00,0.440510663004699E0,0.785398163397448E0,8*0.00/
PI=0.3141592653589793
PI2=PI*2.00
LMAX=34
IDM=4
IDN=2
REWIND 1
C CALCULO DOS COEFICIENTES C(I,P,K)
CALL ELMNE1
C WRITE (6,11) LMAX,IDK,JDN
DO 106 L=2,LMAX,2
C WRITE (6,12) L
J1=(L*L*L/2+3*L*L/4-L/2)/6
IL=L+1
DO 106 IM=1,IL,IDK
M=IM-1
J2=M*(M+1)/2
JI=J1+J2
I=M/IDK+1
DO 105 N=1,IM,IDK
J=(N-1)/IDN+1
105 RES(J)=DQLMN(JI+N-1)
106 WRITE (1,30) (RES(J),J=1,I)
C CALCULO DOS COEFICIENTES DE SIMETRIA CUBICA B(I,M,MU)
CALL CSYB
DO 147 L=4,LMAX,2
L2=L/2-1
JI=L/4+1
JF=NOMB(L2)

```

```

DO 147 MU=1,JF
DO 148 IM=1,JI
148 BB(L2,MU,IM)=DEB(I2,MU,IM)
147 WRITE(6,16) (PE(I2,MU,IM),IP=1,JI)
C
CALCULO DE A' (L,M,S)
DO 143 L=2,LMAX,2
J1=(I*I*L/2+3*I*I/4-L/2)/6
CT=DSOFT(DFLOAT(4*I+2))
IL=L+1
JF=L/2+1
DO 143 IM=1,IL,1DK
M=IM-1
J2=J1+(M+1)*P/2
SI=1.D0
IF (P/2*2-M) 162,163,163
163 IF (P/4*4-M) 164,165,165
162 IF ((M-1)/4*4-M+1) 164,165,165
164 SI=-1.D0
165 FES(1)=DQLMN(J1)*EQLMK(J2)*CT*SI/2.D0
DO 144 IS=2,1,2
I=(IS+1)*IS/2
IF (M-IS) 167,166,166
166 JI=J2+IS
GOTO 144
167 JI=J1+I+M
144 RES(IS/2+1)=DQLMN(JI)*EQLMK(JI+I)*CT*SI
WRITE(2,30) (FES(J),J=1,JI)
143 CONTINUE
C
CALCULO DE A' (L,M,N,S)
DO 150 L=2,LMAX,2
IL=L+1
J1=(I*L*L/2+3*L*I/4-L/2)/6
DO 150 IM=1,IL,2
M=IM-1
JI=(M+1)*M/2+J1
DO 150 IN=1,IL,2
N=IN-1
JF=(N+1)*N/2+J1
RES(1)=DQLMN(JI)*EQLMK(JF)
DO 151 IS=1,L
IF (N-IS) 152,153,153
152 I=(IS+1)*IS/2+N+J1

```

```

      GO TO 154
153 I=JI+IS
154 IP (N-IS) 155,156,156
155 J=(IS+1)*IS/2+N+J1
      GO TO 151
156 J=JF+IS
151 RES (IS+1)=DQLMN(I)*DQLMN(J)*2.DO
      WRITE (3,30) (RES(J),J=1,II)
150 CONTINUE
C   CALCULO DE P(L,M,FRI)
      IPAS=500
      CP=DFLOAT(IPAS)*PI/18.DO3
      JF=9000/IPAS+1
      IF ((IPAS-250).LT.0) JV=JF
      RES(1)=FLOAT(IPAS)/100.
      DO 120 L=2,IMAY,2
      CT=DSORT(DFLOAT(4*L+2))
      IL=L+1
      J1=(L*L*L/2+3*L*I/4-L/2)/6
      DO 120 IM=1,IL,IDE
      M=IM-1
      CX=0.DO
      SI=1.DO
      IF (M/2*2-M) 109,110,110
109  CX=PI2
      IF ((M-1)/4*4-M+1) 111,112,112
110  IF (M/4*4-M) 111,112,112
111  SJ=-1.DO
112  J2=J1+(M+1)*M/2
      DO 123 J=1,JF
      CF=DQLMN(J1)*DQLMN(J2)*SI*CT/2.DO
      DO 124 IS=2,L,2
      I=(IS+1)*IS/2
      IF (M-IS) 113,114,114
114  JI=J2+IS
      GO TO 124
113  JI=J1+I+M
124  CF=CF+DQLMN(JI)*DQLMN(J1+I)*SI*CT*ECCF(CP*DFLOAT((J-1)*IS)-C)
123  RES(J)=CF
      WRITE (4,30) (RES(I),I=1,JF)
120  CONTINUE
      JV=40
125  JF=8

```

```

C      CALCULO DE E(L,M,PHI) - SIMETRIA CUBICA
      DO 130 J=1,JF
      DO 130 L=4,LMAX,2
      I=IOMF(L/2-1)
      JI=L/4+1
      L2=L/2-1
      CT=DCOSCT (DFLCAT (4*I+2))
      J1=(I*L*L/2+3*I*I/4-1/2)/L
      DO 131 MU=1,I
      C=0.00
      DO 132 IM=1,JI
      M=4*(IM-1)
      J2=J1+(M+1)*M/2
      CF=DQLMN(J1)*DQIMK(J2)*CT/2.00
      DO 133 IS=2,I,2
      JN=(IS+1)*IS/2
      IF (*-IS) 115,116,116
115   K=IN+M+J1
      GO TO 133
116   N=J2+IS
133   CF=CF+DQLMN(K)*DQIMK(J1+IK)*CT*CCOS (DFLCAT (IS)*CANG (1,J))
132   C=C+DCOS (DFLCAT (M)*DANG (2,J))*CF*CFE (I2,MU,IM)
131   XK (L2,MU,J)=C
      WRITE (7,30) (XK (I2,MU,J),MU=1,I)
130   CONTINUE
11   FORMAT (1H1,54X,21HCOEFICIENTES C (L,M,N),10X,4HI=2,,I2,4H( 2) /
      *54X,23(1H*),9X,7HP=0, 1(,I2,1H) /
      *86X,7HN=0, *(,I2,1H) ///)
12   FORMAT (1X/64X,2HI=,I2/63X,6(1H+) /)
13   FORMAT (1X/2X,2HM=,I2,4X,1CF12.8/(10X,10F12.8) )
14   FORMAT (1H1,49X,32HFUNCIONES DE LEGENDRE E (L,M,PHI),10X,4HL=2,,I2
      *H( 2)/49X,34(1H*),9X,7HM=0, 1(,I2,1H)/90X,9HPHI=0,90(,F5.2,1H) //
15   FORMAT (1H1,43X,43HCOEFICIENTES DE SIMETRIA (CUBICA) E (L,M,MU),
      *10X,4HL=4,,I2,3H( 2) /
      *43X,46(1H*),2X,9HP=0, 1(4) /
      *96X,9HMD=1,M(L) ///)
16   FORMAT (10F12.8/(10X,10F12.8))
17   FORMAT (1H1,36X,34HFUNCIONES HARMONICAS SIMETRIZADAS (,3A4,11H) E (L
      *U,HI),10X,4HL=2,,I2,3H(2)/36X,59(1H*),8X,9HMD=1,M(L)/103X,16HHI=
      *GVIOS DE HFL ///)
18   FORMAT (1X///61X,5HMKI=(,A4,1H)/60X,12(1H=) //)
19   FORMAT (1X/2X,2HL=,I2,4X,10F12.8/(10X,10F12.8))

```

```

22 FORMAT (1H1,52Y,27(COEFICIENTES APPI (I,M,N,S),10X,4HL=2,,I2,4H(
*/52X,27(1H*),9X,6HE=0,I(,I2,1H)/9CX,7HE=0,L(,I2,1E)/90X,10HS=0,
*( 1)///)
23 FORMAT (1H1,52Y,*(COEFICIENTES APPI (I,M,S) ',10X,'L=2,'I2,' ( 2) '
*/52X,27(1H*),9X,7HE=0,L(,I2,1H)/88X,10HS=0,L( 2)///)
24 FORMAT (1X/1X,2HE=,I2,3H HE=,I2,10F12.8/(10X,10F12.8))
25 FORMAT (1H1,36X,34(FUNCOES HARMONICAS SIMETRIZADAS(.3A4,11H)K(
*MM,HY),10X,4HL=2,,I2,3H(2)/36X,59(1H*),8X,9HE=1,M(I)/103X,1EHHI
*NGHOS DE BKX //4CX,34FO EIXO Z DE KE F UP EIXO DE CRIE ,12///)
26 FORMAT (1X///61X,5HHL=(,A4,1E)/6CX,12(1E=)//33X,4HPI=,D20.13,
*4HPAD.,10X,5HBETA=,D20.13,4HPAD-//)
30 FORMAT (10F12.8/(10F12.8))

```

```
END FILE 1
```

```
STOP
```

```
END
```

```

C SUBROTINA QUE CALCULA OS COEFICIENTES C(I,M,K)
SUBROUTINE DIMNF1
DOUBLE PRECISION FCLM(4046),DDPI(35,35),DIE,DIPSJ,PI,DALPHA
COMMON/PREM/DOIM,PI,IMAX
DALPHA(M,N)=DSQRT(DPLCAT((I+K)*(N+1-K)))
DO 116 L=2,LMAX,2
J1=(I*L*L/2+3*L*L/4-L/2)/6
LPS1=L+1
DDPI(LPS1,LPS1)=1.00/2.00*L
IN=L+1
CALL IRIN(L,IN,DIE)
DDPI(IPS1,1)=DSQRT(DIE)*DPI(IPS1,IPS1)
DDPI(I,1)=0.00
DO 101 J=2,L
IP=LPS1-J
CALL IRIN(IP,IN,DIE)
DDPI(IPS1,J)=ISQRT(DIE)*DPI(IPS1,IPS1)
IF ((IP/2*2-IP).NE.0) DDPI(IPS1,J)=-DPI(IPS1,J)
DDPI(I,J)=DDPI(IPS1,J)*DFICAT(J-1)*DSQRT(2.00/DFLCAT(I))
101 CONTINUE
I=LPS1
105 I=I-1
DO 110 J=2,I
DIPSJ=DFLOAT(I+J-2)
DDPI(I-1,J-1)=(-DIPSJ*2.00*DFLCAT(J-2)*DDPI(I,J)+2.00*DIPSJ*DAIP
*(L,I)*DDPI(I+1,J)+DALPHA(I,I)*DALPHA(I,J)*DPI(I+1,J+1))/(DALPHA
*I,I-1)*DALPHA(I,J-1)
110 CONTINUE

```

```

      IF (I-2) 115,115,105
115  LMS2=I-2
      IF (LMS2.EQ.0) GO TO 114
      DO 113 I=2,LMS2,2
      DDPI (I,1)=0.DO
113  CONTINUE
114  DO 116 I=1,LPS1
      DO 116 J=1,I
      IF ((I-1)/2*2-(I-1).NE.0) DDPI (I,J)=-DDPI (I,J)
      KLIN=J1+I*(I-1)/2+J-1
      DCLMN(KLIN)=DDPI (I,J)
116  CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

C  SUBROUTINA QUE CALCULA OS COEFICIENTES E (I,M,NU)
  SUBROUTINE CSYF
  DOUBLE PRECISION DCLMN(4046),DDPI (35,35),DPROJ (9,9),DDEDUC (9,9)
  DOUBLE PRECISION DEP (16,3,9),PI,DPISC,DDIMS,ENORM,DPISQ
  COMMON/PEEM/DCLMN,PI,IMAX
  COMMON/DEUS/DBE
  DO 3 I=1,16
  DO 3 J=1,3
  DO 3 K=1,9
 3  DBE (I,J,K)=0.DO
  DPISC=DSQRT (PI)
  DPISQ=DPISC*DPISC (2.E0)
  DO 120 L=4,LMAX,2
  DO 1 I=1,9
  DO 1 J=1,9
  DPROJ (I,J)=0.E0
 1  DDEDUC (I,J)=0.E0
  DDIMS=L/4+1
  LL=L/2-1
  J1=(I*1*L/2+3*I+L/4-L/2)/6
  LPS1=I+1
  DO 205 I=1,LPS1,4
  DO 205 J=1,I,4
  KLIN=J1+I*(I-1)/2+J-1
  II=(I-1)/4+1
  JJ=(J-1)/4+1
  IF (J.EQ.1) GO TO 200
  IF (I.EQ.J) DPROJ (II,JJ)=(1.E0+4.E0*DCLMN (KLIN))/3.DO
  IF (I.NE.J) DPROJ (II,JJ)=4.E0*DCLMN (KLIN)/3.E0
  GOTO 204
200 IF (I.EQ.1) DPROJ (II,JJ)=(1.E0+2.E0*DCLMN (KLIN))/3.DO

```

```

      IF (I.NE.1) DFFCJ (II, JJ) = 2.00 * DSQRT (2.10) * DQLEK (KLIK) / 3.00
204 DPROJ (JJ, II) = DFFCJ (II, JJ)
205 CONTINUE
      DDIMS = 0.00
      DO 220 I = 1, IDIME
      DDIMS = DDIMS + DFFCJ (I, I)
220 CONTINUE
      IDIMS = IFIX (SNGL (DDIMS + 0.50))
      IMINS = IDIMH + 1 - IDIMS
      I = IDIMH + 1
160 I = I - 1
      IF (DPROJ (I, I) .GT. 1.0 - 4) GO TO 170
      IF (I - 1) 210, 210, 160
170 DNOFF = DSQRT (DFFCJ (I, I))
      DO 250 J = 1, IDIME
      DFFDC (I, J) = DFFCJ (I, J) / DNOFF
      DFFCJ (I, J) = DFFCJ (I, J) / DFFCJ (I, J)
250 CONTINUE
      IF (I - 1) 210, 210, 160
180 IMS1 = I - 1
      DO 300 ILINE = 1, IMS1
      DO 300 JCOLON = 1, I
      DPROJ (ILINE, JCOLON) = DPROJ (ILINE, JCOLON) - DFFCJ (I, JCOLON) * DPROJ (ILI
      * E, J)
300 CONTINUE
      IF (I - IMINS) 210, 210, 160
210 DO 650 I = IMINS, IDIME
      II = IDIMH - I + 1
      DFFDC (I, 1) = DFFDC (I, 1) / DFFSC
      DFE (II, II, 1) = DFFDC (I, 1)
      DO 650 J = 2, IDIME
      DFFDC (I, J) = DFFDC (I, J) / DFFSC
      DFE (II, II, J) = DFFDC (I, J)
650 CONTINUE
120 CONTINUE
      RETURN
      END
C      SUBROUTINE QUE CALCULA UN COEFICIENTE BINOMIAL
      SUBROUTINE IBIN (II, N, EI)
      DOUBLE PRECISION EI, XM, XI
      BI = 1.00
      IF (2 * IP - K) 630, 630, 640
630 JP = IP

```

6020 650  
 640 JP=X-7P  
 650 IF (11) 699,680,660  
 660 XM=DIQAT(X-JP)  
 DO 670 I=1,JP  
 XI=DIQAT(I)  
 670 PI=(PI\*(XM+XI))/XI  
 680 PERDSM  
 699 WRITE (6,611) I2,M  
 BI=0.50  
 611 FORMAT (1X,3I3)  
 PERDSM  
 END

```

C *****
C ESTE PROGRAMA CALCULA OS COEFICIENTES CLPINI A PARTIR DE
C FIGURAS DE POIS INCCNELFTAS
C *****

```

PROGRAMA NPLSON

```

DIMENSION H(4,14),HI(4),W1(4)
DIMENSION PLPFI(34,35,20),FHSCUB(34,3,8)
DIMENSION PIAP(4,12,12)
DIMENSION A(34,3,12,4)
DIMENSION A2(400,400),E2(400,400),B3(400,400)
DIMENSION F(4,14),A3(400,400)
DIMENSION PE(4)
DIMENSION E(34,34,18)
DIMENSION ALFA(34,34,3,3)
DIMENSION APAT(34,34,12)
DIMENSION BMAT(34,1,12)
DIMENSION CMAT(34,3,12)
DIMENSION C(34,3,12)
DIMENSION INT(12)
DIMENSION IND1(12)
DIMENSION PCMP(12)
DIMENSION IN(34),F(34)
DIMENSION IEHS(4)

```

```

DATA IEHS/3,1,2,8/
DATA NONE/1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/
DATA INT/1,0,1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/
DATA IND1/1,0,1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/

```

CC

C LEITURA DOS ARQUIVOS GRAFICS PELO PROGRAMA BURGE.FORT

CC

```

WRITE(6,*) ' VFSAC 2 '
LMAX=34

```

CC

C LEITURA DE PIMFI.DATA

CC

```

IPAS=500
JF=9000/IPAS+1
DO 1000 L=2,LMAX,2
IL=L+1
DO 1000 IH=1,IL,2
READ (1,33) (PLPFI(L,IP,I),I=1,JF)
33 FORMAT (10F12.8/(10F12.8))
1000 CONTINUE
DO 1001 I=1,19
PLPFI(1,1,I)=1/SQRT(2.)
1001 CONTINUE

```

CC

C LEITURA DE FHSCUB.DATA

CC

```

JF=8

```



```

C   CALCULO DE FIGURA DE PI
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
    LMAX=16
    IF (LMAX.EQ.16) GO TO 2021
    CONTINUE
    K=0
    LMAX=16
    PI=3.14159
    DO 91 I=1,4
    DO 92 IALF=1,18
    DO 93 IBETA=1,18
    H(I,IALF)=H(I,IAIF)+PIAF(I,IALF,IBETA)
93 CONTINUE
    A1=((IALF-1)*5+2.5)*PI/180
    HI(I)=HI(I)+H(I,IALF)*SIN(A1)
    H(I,IALF)=0
92 CONTINUE
    HI(I)=HI(I)*((HI/36)**2)/1.570796
91 CONTINUE
    DO 110 I=1,4
    WRITE(6,*)'FACTOR DE NORMALIZACION'
    WRITE(6,*)HI(I)
    DO 110 IALF=1,18
    DO 110 IBETA=1,18
    PIAB(I,IALF,IBETA)=PIAF(I,IAIF,IBETA)/HI(I)
110 CONTINUE
    DO 111 I=1,4
    HI(I)=0.
111 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   LOOP DO FACTOR DE NORMALIZACION
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
2021 CONTINUE
    DO 196 I=1,4
    DO 197 IALF=1,18
    DO 198 IBETA=1,18
    H(I,IALF)=H(I,IAIF)+PIAF(I,IALF,IBETA)
198 CONTINUE
    A1=((IALF-1)*5+2.5)*PI/180
    HI(I)=HI(I)+H(I,IALF)*SIN(A1)
    H(I,IALF)=0

```

```

197 CONTINUE
HI(I) = HI(I) * ((PI/36)**2)
196 CONTINUE
DO 115 I=1,4
WRITE(6,*) ' INTEGRACION DEFICIS DE NORMALIZADO'
WRITE(6,*) HI(I)
DO 114 IALF=1,18
DO 114 IBETA=1,18
W1(I) = W1(I) + FIAE(I,IALF,IBETA)
114 CONTINUE
WRITE(6,*) 'FATCP W '
WRITE(6,*) W1(I)
W1(I)=252/W1(I)
WRITE(6,*) 'FATCP W '
WRITE(6,*) W1(I)
115 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C          FIM DO LOOP
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
DO 70 I =1,4
DO 80 IALF = 1,18
DO 90 IBETA = 1,18
P(I,IALF)=P(I,IALF) + FIAE(I,IALF,IBETA)**2
90 CONTINUE
A1=((IALF-1)*5+2.5)*PI/180
PE(I) = PE(I) + P(I,IALF) * SIN(A1)
80 CONTINUE
PE(I) = PE(I) * (PI/36)**2
WRITE(7,2) I,PE(I)
2 FORMAT(1X,'PE(',I4,')=',F15.5)
70 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C  CALCULO DE ALMUNJ BK1
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
K=0
PI=3.14159
DO 10 I=1,4
II=IFES(I)
DO 10 L=2,LMAX,2
L2=L/2

```



```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   CALCULO DE ALFAMUMU'
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
DO 140 L1=2,LMAX,2
LL2=L1/2
LL1=L1
IF (L1.EQ.2) LL1=1
L3=LL1/2+1
L4=INT(L3)
DO 140 L=2,LMAX,2
L2=L/2
LI=L
IF (LI.EQ.2) II=1
L3=LI/2+1
L5=INT(L3)
DO 140 MU1=1,14
DO 140 MI=1,15
DO 180 I=1,4
II=IFPS(I)
ALFA (II1,LL,MU1,MI)=ALFA (II1,LL,MU1,MI) + FHSCUB (LI,MI,II) *
* FHSCUB (LL1,MU1,II)
180 CONTINUE
F=4*PI/(2*LL+1)
IF (LL.EQ.1) F=4*PI
ALFA (II1,LL,MU1,MI)=ALFA (II1,LL,MU1,MI) * F
140 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCC
C   MONTAGEM DA MATRIZ
C
CCCCCCCCCCCCCCCC
WRITE (6,*) 'QUASE FIM DO PROGRAMA'
INKI1=LMAX/2+1
DO 350 NI1=1,JNI1
J=0
I=1
LIMIN=(NI1-1)*2
IF (LIMIN.EQ.2) LIMIN=4
IF (LIMIN.EQ.0) LIMIN=2
DO 240 L1A=LIMIN,IMAX,2
L1=L1A
IF (L1.EQ.2) L1=1
L3=L1/2+1
L4=INT(L3)

```

```

DO 240 MU1=1,L4
J=0
DO 200 LA=L1MIN,LMAX,2
L=LA
IF (I.EQ.2) L=1
L5=L/2+1
L6=INT(L5)
DO 200 MI=1,L6
J=J+1
A2(I,J)=E(L1,L,MI)*AIFA(I1,I,MU1,MI)
200 CONTINUE
CC=0
DO 190 II=1,4
WRITE(6,*) 'L1,MI,NI,I,A(I1,MI,NI,I)'
WRITE(6,*) L1,MU1,NI1,I1,A(L1,MU1,NI1,I1)
CC=CC+A(L1,MU1,NI1,II)
190 CONTINUE
BMAT(I,1,NI1)=CC
I=I+1
240 CONTINUE
IDD=I-1
DO 2042 I=1,IDD
2042 CONTINUE
WRITE(6,*) 'IDD'
WRITE(6,*) IDP
WRITE(6,*) 'MATRIZ A SEP. INVERTIDA'
DO 2031 I=1,IDD
WRITE(6,*) I,(A2(I,J),J=1,IDD)
2031 CONTINUE
WRITE(6,*) 'DMAT'
DO 2032 I=1,IDD
WRITE(6,*) I,NI1,EPAT(I,1,NI1)
2032 CONTINUE
DO 1089 I=1,IDD
DO 1089 J=1,IEE
A3(I,J)=A2(I,J)
1089 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C INVERSAO DE MATRIZ
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

```

```

DO 1026 J=1,IDD
B2(J,J)=1
1026 CONTINUE
DO 1025 J=1,IDD
DO 1025 I=J,IDD
IF (A2(I,J).NE.0) GO TO 102
WRITE(6,*) 'DFU PAU'
1025 CONTINUE
102 DO 1042 K=1,IDD
S1=A2(J,K)
A2(J,F)=A2(I,K)
A2(I,F)=S1
S1=F2(J,K)
B2(J,K)=B2(I,K)
B2(I,K)=S1
1042 CONTINUE
T3=1/B2(J,J)
DO 1055 K=1,IDD
A2(J,F)=T3*A2(J,F)
B2(J,K)=T3*B2(J,K)
1055 CONTINUE
DO 1065 L=1,IDD
IF(L.EQ.J) GO TO 1065
T3=-A2(L,J)
DO 1075 K=1,IDD
A2(L,F)=A2(L,K)+T3*A2(J,K)
B2(L,F)=B2(L,K)+T3*B2(J,K)
1075 CONTINUE
1065 CONTINUE
1085 CONTINUE
CCCCC
CCC   ROTINA DE IMPRESSAO DE MATRIZES
CCCCC
DO 269 I=1,IDD
DO 269 J=1,IDD
AMAT(I,J,NI1)=E2(I,J)
269 CONTINUE
DO 291 I=1,IDD
DO 291 J=1,IDD
DO 264 K=1,IDD
C3=C3+A3(I,F)*E2(F,J)
264 CONTINUE

```

```

      B3(I,J)=C3
      C3=0
291  CONTINUE
      DO 2033 I=1,IDD
      DO 2033 J=1,IDE
      A2(I,J)=0
      B2(I,J)=0
2033 CONTINUE
      WRITE(6,*) ' DIMENSAO DA MATRIZ INVERSA '
      WRITE(6,*) IDD
      DO 265 I=1,IDD
      WRITE(6,*) ' I,NI1,AMAT(I,J,NI1) '
      WRITE(6,*) I,NI1,(AMAT(I,J,KI1),J=1,IDE)
265  CONTINUE
      DO 275 I=1,IDD
      CC=0
      DO 270 J=1,IDD
      CC=CC+AMAT(I,J,NI1)*BMAT(J,1,KI1)
270  CONTINUE
      CMAT(I,1,NI1)=CC
275  CONTINUE
      LMIN=(NI1-1)*2
      IF(LMIN.EQ.2) LMIN=4
      IF(LMIN.EQ.0) LMIN=2
      I=0
      DO 300 LA=LMIN,IMAX,2
      L=LA
      IF(L.EQ.2) L=1
      L2=L/2+1
      L3=INT(L2)
      DO 300 MI=1,L3
      I=I+1
      C(L,MI,NI1)=CMAT(I,1,NI1)
300  CONTINUE
350  CONTINUE
      DO 4004 LA=2,IMAX,2
      L=LA
      IF(L.EQ.2) L=1
      L2=L/2+1
      L4=INT(L2)
      DO 4004 MI=1,L4

```

```
INI=I/2+1  
WRITE (6,*) 'L,M1,N11,C(L,M1,N1) '  
WRITE (6,*) L,M1,N11,C(L,M1,N1)  
WRITE (9,*) (C(L,M1,NI),NI=1,INI)  
4004 CONTINUE  
STOP  
END
```

```

C *****
C PROGRAMA PARA LEVANTAMENTO DA FIGURA DE POIOS COMEFITA
C *****

```

PROGRAM CLINI

```

DIMENSION P(4,18)
DIMENSION R(4,18),FPREC(2,4)
DIMENSION PLMFI(34,35,20),FHSCUB(34,3,18)
DIMENSION PIAB(4,18,18)
DIMENSION F(34,18,4)
DIMENSION C(34,3,18)
DIMENSION IMI(18)
DIMENSION NOMB(16)
DIMENSION IPHS(4)
DATA IPHS/3,1,2,8/
DATA NOMB/1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/
DATA IMI/1,0,1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/
PI=3.14159

```

CC

C LEITURA DE PIMFI.DATA

CC

```

LMAX=24
IPAS=500
JF=9000/IPAS+1
DO 1000 L=2,LMAX,2
II=II+1
DO 1000 IM=1,II,2
READ (1,33) (PLMFI(L,IM,I),I=1,JF)
33 FORMAT (10F12.8/(10F12.8))
1000 CONTINUE
DO 1001 I=1,19
PLMFI(1,1,I)=1/SQRT(2.)
1001 CONTINUE

```

CC

C LEITURA DE FHSCUB.DATA

CC

```

JF=8
DO 2000 J=1,JF
DO 2000 L=4,LMAX,2
L2=L/2-1
I=NOMP(L/2-1)
READ(2,33) (FHSCUB(L,MU,J),MU=1,I)
2000 CONTINUE
DO 2001 J=1,JF
FHSCUB(1,1,J)=1/SQRT(2.)
2001 CONTINUE

```

CC

```

JF=8
DO 2200 J=1,JF
DO 2200 L=4,LMAX,2

```

```

L2=L/2-1
I=NOMP(L/2-1)
DO 2200 NI=1,I
2200 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C          I.FITURA DE CIMINI.DATA
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
LMAX=22
DO 4000 L1=2,LMAX,2
L=L1
IF (L.FQ.2) L=1
L2=L/2+1
L4=IMI(L2)
DO 4000 NI=1,L4
INI=L/2+1
READ(4,*) (C(L,NI,NI),NJ=1,INI)
4000 CONTINUE
DO 4008 L1=2,LMAX,2
L=L1
IF (L.FQ.2) L=1
L2=L/2+1
L4=IMI(L2)
DO 4008 NI=1,L4
INI=L/2+1
DO 4008 NI=1,INI
WRITE(6,*) 'L,NI,NI,C(L,NI,NI)'
WRITE(6,*) L,NI,NI,C(L,NI,NI)
4008 CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C          INICIO DO FSCGFAMA
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
DO 10 I=1,4
II=IFRS(I)
DO 10 L1=2,LMAX,2
L=L1
IF (L.FQ.2) L=1
L2=L/2+1
L3=L/2+1
DO 10 NI=1,L3
L4=IMI(L2)

```

```

DO 20 NI=1,L4
FF= FF + C(L,NI,NI) * PHSCOB(I,NI,II) * (-1) ** (NI-1)
20 CONTINUE
L8=L
IF (L.EQ.1) L8=0
P(L,NI,I) = 4 * PI * FF * (-1) ** (I8/2) / (2*L8+1)
WRITE(6,*) 'L,NI,I,F(L,NI,I)'
WRITE(6,*) L,NI,I,F(L,NI,I)
FF=0
10 CONTINUE
DO 60 I=1,4
DO 60 IALF=1,18
DO 60 IBETA=1,18
DO 50 L1=2,LMAX,2
L=L1
IF(L.EQ.2) L=1
INI=L/2+1
DO 50 NI=1,JNI
AA = 1./SQRT(PI)
IF (NI.EQ.1) AA=1./SQRT(2*PI)
BETA = ((IBETA-1)*5) *PI/180
PIAB(I,IALF,IBETA) = PIAB(I,IALF,IBETA) + P(L,NI,I) *
* PIMPI(L,2*NI-1,IALF) * (COS(2*(NI-1)*BETA)) * AA
50 CONTINUE
IF(PIAB(I,IALF,IBETA).LT.0) PIAB(I,IALF,IBETA)=0
WRITE(6,*) 'I, IALF, IBETA, PIAB(I,IALF,IBETA)'
WRITE(6,*) I, IALF, IBETA, PIAB(I,IALF,IBETA)
60 CONTINUE
DO 61 I=1,4
DO 61 IALF=1,18
WRITE(11,*) (PIAB(I,IALF,IBETA),IBETA=1,18)
61 CONTINUE
DO 161 I=1,4
DO 171 IALF=1,18
DO 161 IBETA=1,18
B1= ((IBETA-1)*5)+2.5)*PI/180
H(I,IALF)=H(I,IALF)+PIAB(I,IALF,IBETA)
P(I,IALF)=P(I,IALF)+PIAB(I,IALF,IBETA)*COS(2*B1)
161 CONTINUE
H(I,IALF)=H(I,IALF)*PI/36
P(I,IALF)=P(I,IALF)*PI/36
A1= ((IALF-1)*5+2.5)*PI/180
F1=P1+(3*(COS(A1)**2)-1)*SIN(A1)*H(I,IALF)

```

```

F2=F2+(SIN(A1)**3)*P(I,IAIF)
F3=F3+(SIN(A1)*H(I,IAIF))
171 CONTINUE
P2=F2*PI*(SQRT(15*F1))/(36*F3)
F1=F1*PI*(SQRT(5*F1))/(36*F3)
FPRFC(1,I)=F1
FPRFC(2,I)=F2
F1=0
F2=0
F3=0
181 CONTINUE
DO 1P2 I=1,4
WRITE(6,*) 'I , FPRFC (1) , FPRFC (2) '
WRITE(6,*) I , FPRFC (1,I) , FPRFC (2,I)
182 CONTINUE
STOP
END

```

PROGRAM FDOVF1

C  
C  
C  
C  
C

CALCULO DA FUNCAO DE DISTRIBUICAO DE CIENTACCES -FDO

PIZ CONSTANTE

DIMENSIOE C(16,3,18),A(40),CC(125),D(5,18,35),H(18)  
DIMENSION R(91,91),B(16,3,5),F(19),FSP(3170),E(18,35),G(18)  
DIMENSIOE MCOB(17),FD(19,15,15)  
DATA MCOB/0,1,1,1,1,2,1,2,2,2,2,3,2,3,3,3,3/

C

DATA E/0.0,5.0,10.0,15.0,20.0,25.0,30.0,35.0,40.0,45.0,50.0,  
\*55.0,60.0,65.0,70.0,75.0,80.0,85.0,90.0/  
WRITE(6,\*) ' PDO COM PIZ CONSTANTE'  
XLIP1=0.  
XLIP2=90.  
XIDP=5.  
IDF=5  
LP1=1  
LP2=91  
ILMAX=22  
IMAX=ILMAX/2  
PD=ACOS(-1.)/180.  
RQ2=SQRT(2.)  
READ(4,\*) (C(L3,NU,NU))  
WRITE(6,\*) ' PRIMEIRO CLIBRI'  
WRITE(6,\*) (C(L3,NU,NU))  
DO 10 J=1,3170  
FSP(J)=SIN((J-1)\*PD)  
10 CONTINUE  
DO 30 L=4,ILMAX,2  
L1=L/?  
L3=L1-1  
M1=MCOB(L1)  
DO 30 NU=1,M1  
INI=I/2+1  
READ(4,\*) (C(L3,NU,NU),NU=1,INI)  
WRITE(6,\*) ' L3,NU (C(L3,NU,NU) NU=1,INI)'  
WRITE(6,\*) L3,NU,(C(L3,NU,NU),NU=1,INI)  
30 CONTINUE  
REWIND 2  
REWIND 3  
LHT0=IMAX/2+1  
LHT1=IMAX+1  
LHT2=IMAX\*2+1  
DO 50 NH=1,LHT0  
DO 50 N=1,LHT1  
DO 50 IS=1,LHT2  
50 D(NH,N,IS)=0

```

DO 55 LL=2,LMAX
MP=LL/2+1
NOPT=LL+1
L=LL-1
L1=2*LL+1
ML=MCDE(LL)
DO 55 MU=1,MI
READ (2,17) (P(L,MU,M),M=1,MP)
55 CONTINUE
DO 1 NU=1,4
READ (3,17) (A(I),I=1,3)
1 CONTINUE
DO 84 L=2,LMAX
MUP=L/2+1
LP1=L+1
IK1=L-1
LT2=2*L+1
IT1=MCUP(L)
DO 83 MM=1,MUP
DO 80 N=1,LP1
X = 0.
DO 60 M1=1,LTL
X = X + C(LN1,M1,N) * P(LN1,M1,MM) * ((-1)**L) * ((-1)**(M1+1))
60 CONTINUE
IF (N.EQ.1) X = X * PC2
READ (3,17) (A(I),I=1,LT2)
DO 70 IS=1,IT2
D(MM,N,IS) = D(MM,N,IS) + X * A(IS)
70 CONTINUE
80 CONTINUE
IF (MP.EQ.MUP) GO TO 83
DO 81 N=1,LP1
READ (3,17) (A(I),I=1,IT2)
81 CONTINUE
83 CONTINUE
LAPU= L/2
IAPU=7*IAPU
IF (IAPU.EQ.L) GO TO 84
DO 82 N=1,LP1
READ (3,17) (A(I),I=1,IT2)
82 CONTINUE
84 CONTINUE

```

```

REWIFF3
LD2=LMAX/2+1
LMA1=LMAX+1
IPS=4
JPS=2
NAL=91
NEE=91
DO 240 IF2=IF1,IF2,IDF
DO 150 N=1,LMA1
IV=1
DO 140 IS=1,LMT2
X=0.
I=45+45*IV
DO 130 M=1,LD2
K=M
J=N
120 LH=IPS*(M-1)*(IF2-1)+1+I
130 X=X+D(K,J,IS)*FSE(IH)
E(N,IS)=X
IV=-IV
140 CONTINUE
150 CONTINUE
DO 200 IF=IF1,IF2,IDF
DO 170 N=1,LMA1
X=0.
Y=E(N,1)
DO 160 IS=2,LMT2,2
LE=(IS-1)*(IF-1)+91
LH1=IS*(IF-1)+91
X=X+E(N,IS)*FSE(LH)
Y=Y+E(N,IS+1)*FSE(LH1)
160 CONTINUE
G(N)=Y
F(K)=Y
170 CONTINUE
DO 190 IF1=1,NAL
Z=0.
DO 180 M=1,LMA1
LE=JPS*(M-1)*(IF1-1)+1
Z=Z+G(N)*FSE(LE+90)-H(N)*FSE(LH)
180 CONTINUE
R(IF1,IF)=1.+2.50662827*Z
190 CONTINUE

```

```

200 CONTINUE
   WU=FLOAT(IF2-1)
   WRITE (6,3000) WU,(W(IF1),IF1=1,19)
   DO 210 IF=1,91,5
   IHIVA = 1 + IF/5
   WRITE (6,4000) W(IHIVA),(P(IF,IF1),IF1=1,91,5)
   WRITE (7,4100) (F(IF,IF1),IF1=1,91,5)
210 CONTINUE
240 CONTINUE
C1000 FORMAT (1H1///1X,'FUNCAO DE DISTRIBUICAO-3 PARAMETROS-',5X,
C      *'PROJECAO PI2'////)
C2000 FORMAT (1H1///1X,'FUNCAO DE DISTRIBUICAO-3 PARAMETROS-',5X,
C      *'PROJECAO PI1'////)
3000 FORMAT (1H ,F4.1,2X,19F6.1//)
4000 FORMAT (1H ,F4.1,2X,19F6.1/)
4100 FORMAT (19F6.1)
C 16 FORMAT (1X,10F12.8/(1X,10F12.8))
C 17 FORMAT (10F12.8/(10F12.8))
8000 FORMAT (1X,'X= ',F12.8/)
7000 FORMAT (1X,'ATMOS=',10F12.8/(7X,10F12.8))
C6000 FORMAT (1X/(1X,10F12.8))
16 FORMAT (19F6.1/(19F6.1))
17 FORMAT (10F12.8/(10F12.8))
STOP
END

```

PROGRAM FULF

```

DIMENSION SF(2,2,2,2),SE(3,3,3,3),F2(36C),SI(3,3),DN(3),H(3),
*A(3,3),G(3,3),R1(3,3),F(3,3),F2(3,3),E(3,3),C(3,3),R(3,3),S(3,3).
*UU(40),P1L(300),F2L(300),F1I(300),FDC(19,19,19),E4(36C),VM(19)
INTEGR E1,TT,Y
READ(5,*) DO
READ(5,*) SM(1,1,1,1),SM(1,1,2,2),SM(1,2,1,2)
READ(5,*) SI(1,1),SI(2,2),SI(3,3)
READ(5,*) SI(1,2),SI(1,3),SI(2,3)
CCVV LEITURA PARA ARGUMENTO DE PSI><<
READ(5,*) SP
CCVV LEITURA DO ANG. FI E NUMERO DE DEF.
READ(5,*) FIC,FI
READ(5,*) (M(J),J=1,3)
DO 10 IF2=1,19
DO 10 IF1=1,19
READ(2,4000) (FDC(IF1,IF2,IF1),IF1=1,19)
10 CONTINUE
DO 11 IF2=1,19
DO 11 IF1=1,19
DC 11 IP1=1,19
VM1=FDC(IF1,IF2,IF1)
IF (VM1.GT.VM(IF2)) VM(IF2)=VM1
11 CONTINUE
WRITE(6,*) 'VALOR IC TUDO FEITO'
DO 12 IF2=1,19
WRITE(6,*) IF2,VM(IF2)
12 CONTINUE
SI(2,1)=SI(1,2)
SI(3,1)=SI(1,3)
SI(3,2)=SI(2,3)
PI=ATN(COS(-1.))
P1SCM=0
DO 15 IF2=1,19
DO 15 IF1=1,19
DO 15 IP1=1,19
IF (FDC(IF1,IF2,IF1).LT.0.) FDC(IF1,IF2,IF1)=0
F1I=(IP1-1)*5*PI/180
P1SCM=P1SCM+FDC(IF1,IF2,IF1)*SIN(F1I)
15 CONTINUE
P1SCM=P1SCM*PI*4/(36*36*36)
WRITE(6,*) 'VALOR DA INTEGRAL DA FDC'
WRITE(6,*) P1SCM
DO 17 IF2=1,19
DO 17 IF1=1,19
DO 17 IP1=1,19
FDC(IF1,IF2,IP1)=FDC(IF1,IF2,IF1)/P1SCM
17 CONTINUE

```

```

DO 1010 IGP=1,E
FI=FI*PI
W1=0
PFAD(5,*) (DN(J),J=1,3)
DF=20
SFDO=0.
Q=0.0001
SO=SM(1,1,1,1)-SM(1,1,2,2)-2*SM(1,2,1,2)
FI=FI*PI/180
D1=0
DO 20 I=1,3
D1=D1+DN(I)**2
20 CONTINUE
D1=SQRT(D1)
HN=0
DO 30 I=1,3
HN=HN+H(I)**2
30 CONTINUE
HN=SQRT(HN)
DO 35 I=1,3
DN(I)=DN(I)/D1
H(I)=H(I)/HN
35 CONTINUE
P1=ARCOS(DN(3))
F2=PI/2
IF (P1.EQ.0) GO TO 40
F2=DN(2)/SIN(P1)
F2=ARCOS(F2)
40 IF ((DN(2).GT.0).AND.(DN(1).GT.0)) GO TO 50
IF ((DN(2).LT.0).AND.(DN(1).GT.0)) GO TO 50
IF ((DN(2).GT.0).AND.(DN(1).LT.0)) F2=2*PI-F2
IF ((DN(2).LT.0).AND.(DN(1).LT.0)) F2=2*PI-F2
50 PSI=0
DO 60 I=1,3
PSI=PSI+H(I)*DN(I)
60 CONTINUE
PS1=ARCOS(PSI)
IF (PS1.LT.0) PS1=-PS1
IF (SF.EQ.1) PS1=-PS1
PS1=PS1*180/PI
F1N=FI*180/PI
F2N=F2*180/PI
PSI=ARCOS(PSI)
IF (PS1.LT.0) PS1=-PS1
IF (SF.EQ.1) PS1=-PS1
AL=SIN(PSI)*COS(F1)
AL=ARCOS(AL)
C ROTACAO GO
A(1,1)=COS(F1)*COS(F2)-SIN(F1)*SIN(F2)*COS(PS1)
A(2,1)=-COS(F1)*SIN(F2)-SIN(F1)*COS(F2)*COS(PS1)

```

```

A(3,1)= SIN(F1)*SIN(P1)
A(1,2)= SIN(F1)*CCS(F2)+CCS(F1)*SIN(F2)*CCS(F1)
A(2,2)=-SIN(P1)*SIN(F2)+CCS(F1)*CCS(F2)*CCS(F1)
A(3,2)=-COS(F1)*SIN(P1)
A(1,3)= SIN(F2)*SIN(P1)
A(2,3)= COS(F2)*SIN(P1)
A(3,3)= COS(P1)
L2=0
HH=0
65 W1=W1+DW
K=W1*PI/180
C POTACAO EM TORNO DA DIF. LOCAL
G(1,1)=(1-DN(1)**2)*CCS(W)+DK(1)**2
G(1,2)=DN(1)*DN(2)*(1-COS(W))+DN(3)*SIN(W)
G(1,3)=DN(1)*DN(3)*(1-COS(W))-DN(2)*SIN(W)
G(2,1)=DN(1)*DN(2)*(1-COS(W))-DN(3)*SIN(W)
G(2,2)=(1-DN(2)**2)*COS(W)+DK(2)**2
G(2,3)=DN(2)*DN(3)*(1-COS(W))+DN(1)*SIN(W)
G(3,1)=DN(1)*DN(3)*(1-COS(W))+DK(2)*SIN(W)
G(3,2)=DN(2)*DN(3)*(1-COS(W))-DN(1)*SIN(W)
G(3,3)=(1-DN(3)**2)*CCS(W)+DK(3)**2
DO 70 I=1,3
DO 70 J=1,3
E1(I,J)=0
70 CONTINUE
DO 80 I=1,3
DO 80 J=1,3
DO 80 K=1,3
B1(I,J)=B1(I,J)+G(I,K)*A(K,J)
80 CONTINUE
IF (PSI.LT.0.02) GO TO 120
Z=0
X=AL
DO 90 I=1,3
Z=Z+E(Z)*B1(I,1)
90 CONTINUE
Z=APCCS(Z)
Z1=Z*180/PI
X1=X*180/PI
IF (FI.EQ.0) CALL FIO(TT,BT,ET,Z)
CONTINUE
IF (FI.EQ.0) GO TO 110
IF ((Z.LT.0).AND.(X.GT.0)) Z=Z+2*PI
IF ((Z.GT.0).AND.(X.LT.0)) Z=Z-2*PI
L2=L2+1
IF (I2.GT.1) GO TO 110
HH=HH+1
IF (HH.GT.1) GO TO 100
IF (Z.GT.X) DW=-DW
100 IF (Z.GT.X) I2=0

```

```

GO TO 65
110 IF ((Z.LT.(X+Q)).AND.(Z.GT.(X-Q))) GO TO 120
IF (FI.EQ.0) GC TO 65
IF (Z.LT.X) GC TO 65
W1=W1-DW
DW=DW/2
GO TO 65
120 F1=-360/E1
DW=360/F1
C
PCACAO EM TOPNO IF HKI
DO 80C Y=1,E1
W1=W1+DW
W=W1*PI/180
D(1,1)=(1-H(1)**2)*COS(W)+F(1)**2
D(1,2)=H(1)*H(2)*(1-COS(W))+F(3)*SIN(W)
D(1,3)=H(1)*H(3)*(1-COS(W))-F(2)*SIN(W)
D(2,1)=H(1)*H(2)*(1-COS(W))-F(3)*SIN(W)
D(2,3)=H(2)*H(3)*(1-COS(W))+F(1)*SIN(W)
D(3,1)=H(1)*H(3)*(1-COS(W))+F(2)*SIN(W)
D(3,2)=H(2)*H(3)*(1-COS(W))-F(1)*SIN(W)
D(2,2)=(1-H(2)**2)*COS(W)+F(2)**2
D(3,3)=(1-H(3)**2)*COS(W)+F(3)**2
DO 130 I=1,3
DO 130 J=1,3
B2(I,J)=0
130 CONTINUE
DO 140 I=1,3
DO 140 J=1,3
DO 140 K=1,3
B2(I,J)=B2(I,J)+D(I,K)*B1(K,J)
140 CONTINUE
C
CALCULO DE FI1, FI2, FI3
P1=ARCCOS(B2(3,3))
IF (P1.EQ.0) GC TO 450
F2=B2(2,3)/SIN(P1)
F2=ARCCOS(F2)
IF ((F2(2,3).GT.0).AND.(E2(1,3).GT.0)) GO TO 420
IF ((F2(2,3).LT.0).AND.(E2(1,3).GT.0)) GO TO 420
IF ((F2(2,3).GT.0).AND.(E2(1,3).LT.0)) F2=(2*FI-F2)
IF ((F2(2,3).LT.0).AND.(E2(1,3).LT.0)) F2=(2*FI-F2)
420 F1=-F2(3,2)/SIN(F1)
F1=ARCCOS(F1)
IF ((F2(3,2).LT.0).AND.(E2(3,1).GT.0)) GC TO 470
IF ((F2(3,2).GT.0).AND.(E2(3,1).GT.0)) GO TO 470
IF ((F2(3,2).LT.0).AND.(E2(3,1).LT.0)) F1=(2*FI-F1)
IF ((F2(3,2).GT.0).AND.(E2(3,1).LT.0)) F1=(2*FI-F1)
GO TO 470
450 F1=ARCCOS(B2(1,1))
IF ((E2(2,2).GT.0).AND.(B2(1,2).GT.0)) GO TO 470

```

```

IF ((P2(2,2).LT.0).AND.(E2(1,2).GT.0)) GC TO 470
IF ((P2(2,2).GT.0).AND.(P2(1,2).LT.0)) P1=(2*FI-P1)
IF ((P2(2,2).LT.0).AND.(E2(1,2).LT.0)) F1=(2*FI-F1)
470 DO 500 I=1,3
DO 500 J=1,3
B(J,J)=R2(J,I)
500 CONTINUE
F1L(Y)=F1*180/PI
F2L(Y)=F2*180/PI
P1L(Y)=P1*180/PI
DO 505 IJK=1,3
IF (F1L(Y).GT.90) F1I(Y)=F1L(Y)-90
IF (F2L(Y).GT.90) F2I(Y)=F2L(Y)-90
IF (P1L(Y).GT.90) P1I(Y)=F1I(Y)-90
505 CONTINUE
PA1=F1L(Y)/5-INT(F1L(Y)/5)
PA2=F2L(Y)/5-INT(F2L(Y)/5)
PA3=F1L(Y)/5-INT(F1L(Y)/5)
IF (PA1.LT.0.5) F1I(Y)=INT(F1I(Y)/5)*5
IF (PA2.LT.0.5) F2I(Y)=INT(F2I(Y)/5)*5
IF (PA3.LT.0.5) P1I(Y)=INT(P1I(Y)/5)*5
IF ((PA1.GT.0.5).OR.(PA1.EQ.0.5)) F1I(Y)=INT(F1L(Y)/5)*5+5
IF ((PA2.GT.0.5).OR.(PA2.EQ.0.5)) F2I(Y)=INT(F2L(Y)/5)*5+5
IF ((PA3.GT.0.5).OR.(PA3.EQ.0.5)) P1I(Y)=INT(P1L(Y)/5)*5+5
Z2=0
DO 550 I=1,3
Z2=Z2+B(2,I)*H(I)
550 CONTINUE
IF ((Z2.GT.0).AND.(PSI.GT.C)) GC TO ECC
IF ((Z2.LT.0).AND.(PSI.LT.C)) GC TO ECO
DO 570 J=1,3
B(2,J)=-B(2,J)
570 CONTINUE
600 CONTINUE
C CALCPIC DA MATRIZ DE CORRELANCA
C(1,1)=COS(FI)*CCS(PSI)
C(1,2)=SIN(FI)*CCS(PSI)
C(1,3)=-SIN(PSI)
C(2,1)=-SIN(FI)
C(2,2)=COS(FI)
C(2,3)=0
C(3,1)=COS(FI)*SIN(PSI)
C(3,2)=SIN(FI)*SIN(PSI)
C(3,3)=COS(PSI)
DO 650 J=1,3
DO 650 K=1,3
R(J,K)=0
650 CONTINUE
DO 700 J=1,3
DO 700 K=1,3

```

```

DO 700 L=1,3
R(J,F)=E(J,F)+C(J,L)*E(L,F)
700 CONTINUE
DO 720 I=1,3
DO 720 J=1,3
S(I,J)=0
720 CONTINUE
C CALCULO DAS CONSTANTES ELASTICAS
DO 750 K=1,3
S(1,1)=S(1,1)+SO*F(1,K)**2*P(3,K)**2
S(2,2)=S(2,2)+SO*F(2,K)**2*F(3,K)**2
S(3,3)=S(3,3)+SO*F(3,K)**4
S(1,2)=S(1,2)+SO*F(1,K)*F(2,K)*R(3,K)**2
S(1,3)=S(1,3)+SO*F(1,K)*F(3,K)**3
S(2,3)=S(2,3)+SO*F(2,K)*F(3,K)**3
750 CONTINUE
S(1,1)=S(1,1)+SM(1,1,2,2)
S(2,2)=S(2,2)+SM(1,1,2,2)
S(3,3)=S(3,3)+SM(1,1,2,2)+2*SP(1,2,1,2)
C CALCULO DA DEFORMACAO
AA= S(1,1)*(COS(FI)**2)*(CCS(FSI)**2)+S(2,2)*(SIN(FI)**2)+S(3,3)
* (COS(FI)**2)*(SIN(PSI)**2)-S(1,2)*SIN(2*FI)*CCS(FSI)+S(1,3)*
* (COS(FI)**2)*SIN(2*PSI)-S(2,3)*SIN(2*FI)*SIN(FSI)
BB= S(1,1)*(SIN(FI)**2)*(CCS(FSI)**2)+S(2,2)*(COS(FI)**2)+S(3,3)
* (SIN(FI)**2)*(SIN(PSI)**2)+S(1,2)*SIN(2*FI)*CCS(PSI)+S(1,3)*
* (SIN(FI)**2)*SIN(2*PSI)+S(2,3)*SIN(2*FI)*SIN(PSI)
CC= S(1,1)*(SIN(2*FI))*(CCS(FSI)**2)-S(2,2)*(SIN(2*PSI))+S(3,3)*
* SIN(2*FI)*(SIN(PSI)**2)+2*S(1,2)*COS(2*FI)*CCS(PSI)+S(1,3)*
* (SIN(2*FI))*SIN(2*PSI)+2*S(2,3)*CCS(2*FI)*SIN(PSI)
DD= S(1,1)*(SIN(FSI)**2)+S(3,3)*(CCS(FSI)**2)-S(1,3)*SIN(2*PSI)
EE=-S(1,1)*(COS(FI))*(SIN(FSI*2))+S(3,3)*CCS(FI)*(SIN(2*FSI))+
*2*S(1,2)*SIN(FI)*SIN(FSI)+2*S(1,3)*CCS(FI)*CCS(2*PSI)-2*S(2,3)*
* (SIN(FI))*COS(PSI)
FF=-S(1,1)*(SIN(FI))*(SIN(FSI*2))+S(3,3)*SIN(FI)*(SIN(2*FSI))-
*2*S(1,2)*COS(FI)*SIN(FSI)+2*S(1,3)*SIN(FI)*CCS(2*PSI)+2*S(2,3)*
* (COS(FI))*COS(PSI)
IF1=F1L(Y)/5+1
IF2=F2L(Y)/5+1
IP1=F1L(Y)/5+1
E2(Y)=(AA*SI(1,1)+BB*SI(2,2)+CC*SI(1,2)+
*DD*SI(3,3)+EE*SI(1,3)+FF*SI(2,3))*FDC(IF1,IF2,IP1)
E4(Y)=(AA*SI(1,1)+BB*SI(2,2)+CC*SI(1,2)+
*DD*SI(3,3)+EE*SI(1,3)+FF*SI(2,3))
SFDC=SFDO+FDO(IF1,IF2,IP1)
800 CONTINUE
DH=0
DAL=0
DO 900 I=1,E1
DH=DH+E2(I)

```

```

DAL=DAL+E4(I)
900 CONTINUE
IF (SFDO.LT.0.02) DM=0
IF (SFDO.LT.0.02) GOTO 910
DM1=DM/SFDC
DAL=DAL/E1
910 CONTINUE
DI=DO*(DM1+.00001+1)
WRITE(6,*) ' FSJ   CALENT.   , LM/SPEC ,   DIST. INT., SFDO'
WRITE(6,*) PS1,DAL,DM1,DI,SFDC
PS1=(SIN(PS1*PI/180)*SIN(PS1*PI/180))
WRITE(66,4100) DI
1010 CONTINUE
4000 FORMAT (19F6.1)
4100 FORMAT (F8.6)
STOP
END
SUBROUTINA PARA FI=0
SUBROUTINE FIC(IT,UU,DW,2)
DIMENSION UU(100)
IT=IT+1
UU(IT)=Z
UU(1)=1000
IF (UU(IT).LT.UU(IT-1)) GO TO 1000
DW=-DW/2
1000 CONTINUE
RETURN
END

```