

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

EDSON MASCARENHAS SANTOS

**MODELO PARA ANÁLISE DE TENSÕES
PRINCIPAIS BIAxIAL E TRIAXIAL EM
MATERIAIS ORTOTRÓPICOS ATRAVÉS DE
MEDIDAS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X**

VITÓRIA
2010

EDSON MASCARENHAS SANTOS

**MODELO PARA ANÁLISE DE TENSÕES
PRINCIPAIS BIAXIAL E TRIAXIAL EM
MATERIAIS ORTOTRÓPICOS ATRAVÉS DE
MEDIDAS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando.

VITÓRIA
2010

A mente que se abre a uma nova idéia jamais
volta ao seu tamanho original . . .

Einstein

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à minha esposa Nilma, meus filhos, Thiago e Rebeca, aos meus pais, Delcio e Mariolinda, aos meus irmãos, Raimundo, Idelce, Robson, Lúcia, Cinho, Tatiane e aos meus familiares que de muitas formas me incentivaram e ajudaram para que fosse possível a concretização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a todas as pessoas e instituições que proporcionaram os meios para que este trabalho pudesse ser realizado e de modo especial:

Ao Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando pela orientação, incentivo, confiança e amizade.

Aos amigos Alvaro e Miltão pelas tardes de discussões sobre o tema.

Ao amigo Junior pelo apoio e companheirismo.

Aos colegas do Departamento de Física da Universidade Estadual de Feira de Santana pela oportunidade dada para a realização desse trabalho.

Ao CNPq Grant 504578/2004-9 e ao Laboratório Nacional de Luz Síncrotron-LNLS - linha DRX1 pelo apoio técnico.

Aos meus irmãos pela compreensão nas faltas que cometi ao trato com minha mãe.

A minha amada Nilma que sempre está concordando comigo ou não, mas do meu lado.

Resumo

Este trabalho teve o objetivo de desenvolver expressões para o cálculo das tensões principais biaxial e triaxial em materiais policristalinos anisotrópicos. Com as equações proposta foi possível determinar constantes elásticas usando a Teoria da Elasticidade dos Meios Contínuos para pequenas deformações. A relação constitutiva entre deformação e tensão foi considerada ortotrópica, obedecendo à lei de Hooke generalizada. Uma das técnicas que podem ser aplicada na obtenção das tensões e das constantes elásticas é a difração de raios X, pois as condições experimentais são análogas as hipóteses do modelo, ou seja, medem pequenas deformações em comparação as dimensões da amostra e a ordem de grandeza das tensões envolvidas está no regime elástico. Sendo assim, baseado nas equações obtidas, foi possível usar a técnica de $\sin^2 \psi$ de difração de raios X para materiais com textura e anisotrópicos, fazendo, em primeiro lugar, uma caracterização da textura através das figuras de pólos para definir os possíveis ângulos ψ que podem ser usados na equação. Em seguida, determinou-se a deformação para cada pico de difração com os ângulos ψ obtidos com as figuras de pólo. Conhecendo as constantes elásticas do material, pode-se usar a equação no cálculo da tensão residual em um material.

É apresentado um teste da coerência das equações obtidas comparando com as equações existentes na literatura para materiais isotrópicos e aplicando o modelo para tensão principal biaxial junto com os dados experimentais do trabalho de D. Faurie e colaboradores possibilitou encontrar e comparar as constantes elásticas do nosso modelo com o trabalho citado.

Abstract

In this work it was developed expressions for the calculation of biaxial and triaxial principals stresses in polycrystalline anisotropic materials. Taken into account these mathematic expressions was possible to determine the elastic constants using the Theory of Elasticity Continuum for small deformations. The constitutive relation between strain and stress must be considered orthotropic, obeying the generalized Hooke's law. One technique that can be applied to obtain the stresses and elastic constants was the X-ray diffraction, because the experimental conditions are similar to the assumptions of the model, ie, measure small deformations compared the sample sizes and magnitude of stress is involved in the elastic range. Therefore, based on the equations obtained, here it is possible to use the technique of x-ray diffraction $\sin^2 \psi$ for materials with texture or anisotropic, determining, first, a characterization of the texture through the pole figures in order to determine possible angles ψ , which can be used in our equation. Next, it was determined the deformation for each diffraction peak with the angles ψ obtained from the pole figures. As considering the elastic constants of the material knowledge, our can use equation to calculate the residual stress in a material. We presented a test of the consistency of our equations by comparing with the equations in the literature for isotropic materials, moreover we applied the model to biaxial principal stress, using experimental data from the work of D. Faurie *et al*, in order to be possible to compare the elastic constants obtained with the study reported.

Lista de Tabela

1.1	Radiações Características dos Principais Materiais Utilizados em Tubos de raios X	10
4.1	Comparação dos resultados do trabalho de Faurie <i>et al</i> ([19]) com os resultados do nosso modelo.	68

Lista de Figuras

1.1	Raios X espalhados por um único elétron ref.[23]	13
1.2	Deformação por expansão ou contração dos valores de d	28
2.1	Diagrama do ensaio de tração: (a) Material dúctil; (b) Material frágil .	32
2.2	Conceito de tensão no ponto de um sólido [30].	36
2.3	Decomposição da tensão total nas suas componentes no plano [30]. . .	37
2.4	Representação das tensões e respectiva notação num elemento tridi- mensional [30].	39
2.5	Deformação e deslocamento de um elemento de volume de um corpo sujeito a um sistema de forças [30].	40
3.1	Sistema de coordenadas do laboratório (L_i) e o sistema de coorde- nadas da amostra (P_i).	53
4.1	Evolução da deformação, $\varepsilon_{0,\psi}$, em função da carga aplicada no compósito filme/substrato para cada família de planos[19].	62
4.2	Dados experimentais para a direção de medida longitudinal ($\varepsilon_{0,\psi}$) para os estados de carga $T_1 - T_5$ [19].	63
4.3	Curva experimental, $(\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2})X \sin^2 \psi$ para carga aplicada [19]. . .	64
4.4	Inclinação P das retas dos gráficos $(\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2})X \sin^2 \psi$ em função de $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$	66
4.5	Gráfico de deformação versus $\sin^2 \psi$ com fator de correlação R. . . .	67

4.6	Gráfico de $(\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2})X \sin^2 \psi$.	68
-----	--	----

Índice

Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de tabelas	vi
Lista de figuras	vi
Índice	1
Introdução	3
1 Difração de Raios X	9
1.1 Teoria de Difração de Raios X	9
1.1.1 Produção de Raios X	9
1.1.2 Lei de Bragg	11
1.2 Teoria de espalhamento	12
1.2.1 Espalhamento por um elétron	12
1.2.2 Espalhamento elástico por duas partículas	15
1.2.3 Espalhamento elástico por um conjunto de partículas	18
1.2.4 Espalhamento por uma distribuição contínua de matéria	19
1.2.5 Fator de espalhamento atômico dos raios X	20
1.2.6 Análise de Fourier	21

<i>ÍNDICE</i>	2
1.2.7 Equação básica	22
1.2.8 Partículas pontuais	23
1.2.9 Teorema da convolução	24
1.2.10 Transformadas de estruturas cristalinas	24
1.3 Método do Pó	25
1.3.1 Introdução	25
1.3.2 Uso do método do pó	26
1.3.3 Distorções Anisotrópicas em picos padrões	26
1.3.4 Orientação Preferencial	27
1.3.5 Tensão Residual e Deformação	28
2 A teoria da elasticidade linear	29
2.1 Introdução	29
2.2 Diagrama Tensão-Deformação	30
2.3 Deformação Volumétrica	33
2.4 A Lei de Hooke Generalizada	34
2.4.1 Introdução	34
2.4.2 Tensor das tensões	35
2.4.3 Tensor deformação	40
2.4.4 Tensor de elasticidade	42
3 Tensões principais biaxial e triaxial	49
3.1 Introdução	49
3.2 Deformação, Tensão e Sistema de Coordenada	52
3.3 Estado de Tensão Principal Triaxial	55
3.4 Estado de Tensão Principal Biaxial	56

<i>ÍNDICE</i>	3
4 Análise de Coerência da Equação Ortotrópica	57
4.1 Introdução	57
4.2 Estado de Tensão Principal Triaxial	58
4.3 Estado de Tensão Principal Biaxial	59
4.4 Coerência experimental para o estado principal biaxial de tensão . . .	60
5 Conclusões e perspectivas futuras	70

Introdução

Segundo a definição padrão, as tensões residuais são tensões que existem internamente no material em equilíbrio provocado por forças ou tensões externas depois de aplicado no material na temperatura constante [1]. Nas ciências de materiais, o estudo de tensões residuais é de bastante interesse para diferentes aplicações tecnológicas, por exemplo, barreiras térmicas e resistência à corrosão na estrutura metálica [2], tensão mecânica de magnetos supercondutores [3], a tensão residual no filme fino [4], fadiga à corrosão em ligas amplamente utilizada para componentes estruturais de aviões [5], e assim por diante.

Considerando o parágrafo acima, podemos ressaltar a importância de desenvolvermos estudos na temática das tensões residuais e classificar como intrínsecas e extrínsecas, a saber:

Tensões intrínsecas - São aquelas que surgem durante o crescimento de um material e geralmente advêm de defeitos incorporados à estrutura do material;

Tensões extrínsecas - São aquelas que surgem depois do crescimento do material e geralmente tem como causa os efeitos térmicos e mecânicos sobre o material.

Do ponto de vista experimental, a avaliação das tensões residuais nos materiais pode ser feita por diferentes métodos ou técnicas:

- Métodos Mecânicos - São lineares e utilizam métodos de dissecação e método secção, sobre a amostra. Como exemplos de dissecação têm: o método do núcleo toroidal ("ring core method") e o método de perfuração ("hole-drilling

method”); e como exemplo de secção tem o método da remoção de materiais [6]. Consequentemente os métodos mecânicos são destrutivos.

- Métodos Elásticos não lineares - Utilizam métodos que modificam inelasticamente a estrutura da amostra. Como exemplos têm: Técnicas ultrasônicas e magnéticas [7].
- Técnicas de Difração - São lineares e utilizam o fenômeno da difração devido à incidência de uma onda sobre amostra, por meio de um espalhamento elástico. Como exemplos têm difração de raios X [2, 4] e difração de neutrons [8, 9]. Consequentemente não é um método destrutivo.

A medida da tensão residual não pode ser determinada diretamente. Para obter a tensão residual medimos algumas propriedades do material como a deformação [2, 8, 10]. Os métodos citados acima nos fornecem, portanto as deformações.

As tensões residuais em um material surgem de várias fontes e, em geral, eles podem ser divididos em três categorias [11], de acordo com a sua escala de comprimento:

- Tensão tipo I, que varia em uma escala de comprimento de muitos grãos (por exemplo, milímetros); é, por definição, independente da orientação dos grãos individuais, conhecido como macros-tensão [11]. É considerada homogênea ao longo de um grande número de domínios de cristal do material [12];
- Tipo II (tensão inter-granular), que varia de grão a grão. É considerado homogênea dentro dos domínios pequenos do cristal do material (um único grão ou fase) [12];
- Tensão tipo III, que se origina de defeitos locais e flutua dentro de um grão. Há

homogeneidade nos pequenos domínios dos cristais (aproximadamente, distâncias interatômicas)[12].

No caso geral, quando o material apresenta o estado de tensão residual em um ponto, existem as superposições das tensões do tipo I, II e III.

Um cristal é caracterizado por um arranjo periódico de pontos aos quais associamos elementos físicos ao espaço. Por esta razão, em geral, é gerada uma dependência das propriedades cristalinas sobre direções escolhidas, denominada como anisotropia. A maioria dos sólidos naturais e artificiais contém muitos cristalitos os quais podem ter diferentes tamanhos formas e orientações. Os cristalitos são as unidades de monocristais microscópicos do material.

As orientações preferenciais dos cristalitos em um material é denominada textura [13]. A textura é uma característica intrínseca de metais, cerâmicas, polímeros e rochas e tem uma influência determinante sobre a anisotropia de suas propriedades físicas.

A influência da textura sobre a tensão residual é um problema bastante difundido na literatura atual [14] e, do ponto de vista teórico e experimental, ainda está em aberto.

Alguns trabalhos foram desenvolvidos nesta temática. Por exemplo:

- A determinação da razão de Poisson de materiais ortotrópicos investigada por Lempriere [15],
- A aplicabilidade da técnica destrutiva de perfuração para a determinação experimental de tensões residuais em materiais filmes finos retangulares ortotrópico que foi investigada por Lake *et al* [16] e Schajer & Yang [17],
- A determinação da tensão em filmes finos texturizados usando difração de raios

X, que foi investigada por Clemens [18],

- A determinação de constantes elásticas de um filme fino de ouro texturizado, combinando difração de raios X de luz síncrotron e testes de tração em "situ" investigada por Faurie *et al* [19],
- A análise sobre o modelo ortotrópico aplicado à madeira e suas propriedades elásticas investigada por Mascia [20].

Nesse trabalho, investigamos a influência da textura sobre a tensão residual do tipo I ou macro-tensão em um material. A nossa proposta foi desenvolver um modelo que leve em consideração a anisotropia do material supondo ser ortotrópico para pequenas deformações. Um material é dito ser ortotrópico quando há três eixos ortogonais de simetria com propriedades elásticas diferentes. Neste sentido nossa proposta difere das anteriores até agora estudados, pois consideramos a anisotropia ortotrópica para a técnica de difração.

A hipótese usada no desenvolvimento do nosso modelo foi a de pequenas deformações. Tal hipótese implica que consideramos as deformações principais, que são responsáveis pela mudança do volume da amostra, sem considerar as deformações responsáveis pela mudança da forma, ou seja, as deformações tangenciais, portanto isso nos permitiu utilizar a teoria da elasticidade dos meios contínuos, no regime elástico, sendo a relação constitutiva entre deformação e tensão dada pela lei de Hooke Generalizada.

Considerando do ponto de vista experimental, a tensão residual pode ser medida através da técnica da difração. Nosso modelo se aplica às técnicas de difração (raios X, neutrons), pois, as condições experimentais são análogas à hipótese do modelo, ou seja, medem pequenas deformações em comparação as dimensões da amostra e a ordem de grandeza das tensões envolvidas está no regime elástico.

Na técnica de $\sin^2\psi$ por difração, a presença de textura em um material provoca uma relação não linear ("snake-like" curves) no gráfico $\varepsilon_{\phi\psi}^{hkl} X \sin^2\psi$ [14]. Apesar de que, na literatura, não é mostrada a utilização desta técnica para materiais texturados, vale frisar que os trabalhos existentes tentam corrigir os efeitos da não linearidade [21, 22] por procedimentos semiempíricos, a exemplo da técnica de Marion-Cohen [5].

No nosso modelo demonstramos que, sob considerações apropriadas, podemos continuar usando a técnica de $\sin^2\psi$, mesmo para materiais com textura.

Este trabalho está dividido da seguinte maneira: No primeiro capítulo, fazemos uma revisão da técnica de difração de raios X existente na literatura. No segundo capítulo, fazemos uma revisão da hipótese do modelo e da relação constitutiva entre a deformação e a tensão para materiais ortotrópicos usando a lei de Hooke Generalizada. No terceiro capítulo, desenvolvemos uma expressão para a tensão principal triaxial e biaxial. No quarto capítulo, fazemos um teste da coerência das equações obtidas comparando com as equações existentes na literatura para materiais isotrópicos e aplicamos o modelo para tensão biaxial, utilizando os dados experimentais do trabalho de D. Faurie e colaboradores [19], o que possibilitou observar as ordens de grandeza das constantes elásticas. No quinto capítulo, apresentamos as nossas conclusões.

Capítulo 1

Difração de Raios X

1.1 Teoria de Difração de Raios X

1.1.1 Produção de Raios X

Os raios X podem ser produzidos em laboratório pela colisão de um feixe de elétrons com um alvo metálico. O espectro consiste de uma banda larga de radiação contínua ("bremsstrahlung" ou radiação branca). A radiação contínua é produzida pela desaceleração dos elétrons no átomo do elemento alvo [23]. Este mecanismo produz uma distribuição larga de energias de raios X, proporcional às energias dos elétrons incidentes, ou seja:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{V} = \frac{12,398}{V} \quad (1.1)$$

onde V é a voltagem aplicada. No espectro aparecem algumas linhas estreitas sobrepostas com o espectro contínuo. A intensidade dessas linhas é dependente da corrente do tubo de raios X e da voltagem, sendo que λ_{min} correspondente ao comprimento de onda mínimo (energia máxima) que um elétron pode perder numa única colisão.

A produção da radiação característica está baseada na interação entre os elétrons do átomo e a partícula incidente. O elétron do átomo alvo pode ser removido da sua posição atômica e deixar o átomo ionizado. O elétron livre é chamado fóton-elétron

que sairá do átomo com energia cinética $E - \phi$ onde E é a energia do fóton incidente e ϕ_e é a energia do elétron ligado. Quando um elétron da camada L é transferido para a camada K ocupando uma vacância do nível, ocorre o efeito de produção de fótons com energia igual a $\phi_k - \phi_l$ que é chamado de fóton de raios X $K\alpha$. A energia dessa radiação é:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.2)$$

onde h é a constante de Planck e c é a velocidade da luz. A região do espectro eletromagnético que corresponde aos raios X está entre $0,1 - 100\text{\AA}$. Em energia será no intervalo de $0,1 \text{ keV}$ e 100 keV .

Como a energia para cada nível varia com o elemento atômico do alvo, cada tipo de alvo produz radiações características em diferentes comprimentos de onda. A tabela 1 mostra alguns detalhes sobre os comprimentos de onda para os materiais mais utilizados em tubos de raios X [24].

Table 1.1: Radiações Características dos Principais Materiais Utilizados em Tubos de raios X

Elemento	$K\alpha_1(\text{\AA})$	$K\alpha_2(\text{\AA})$	$K\beta_1(\text{\AA})$	Filtro Beta
Cr	2,28970	2,29361	2,08487	V
Fe	1,93604	1,93998	1,75661	Mn
Co	1,78896	1,79285	1,62079	Fe
Cu	1,54056	1,54439	1,39221	Ni
Mo	0,70930	0,71359	0,63228	Zr

A limitação fundamental no uso de raios X é que a intensidade máxima do feixe está limitada pela necessidade de se evitar o aquecimento demasiado do alvo. A produção de raios X através de tubos não é muito eficiente, sendo que a maior parte da energia do feixe de elétrons incidente é perdida na forma de calor. Isto pode ser resolvido em parte usando alvos giratórios, de forma que o feixe de elétrons não incida

em uma única área do anodo. Além disso, o comprimento de onda dado por um tubo de raios X não é sintonizável.

Estes problemas, de se obter um feixe sintonizável e uma boa intensidade, podem ser resolvidos usando-se fontes de luz síncrotron. A luz de uma fonte síncrotron é produzida quando cargas elétricas aceleradas a velocidades relativísticas são defletidas por campos magnéticos [24]. Essas cargas, em geral elétrons ou pósitrons, percorrem uma órbita fechada dentro de um sistema em alto-vácuo, o que dá origem à expressão anel de armazenamento. As principais características que fazem as fontes síncrotron serem únicas são a alta intensidade, amplo espectro de energia e características de polarização da luz emitida, entre outras. A luz é emitida na direção tangencial à trajetória das partículas e praticamente com toda a intensidade colimada no plano da órbita, dessa maneira a luz emitida tem a forma de um leque.

Uma parte dessa luz é levada para fora do anel de armazenamento e aproveitada nas estações experimentais. Estas estações são chamadas de linhas de luz e podem existir várias delas operando independentemente em um mesmo anel de armazenamento.

Uma das vantagens da utilização de radiação síncrotron em relação aos tubos de raios X padrão é que o comprimento de onda é sintonizável. Isso pode ser importante para tipos especiais de experiências de difração, quando a energia do fóton de raios X está perto de uma energia de absorção ressonante de um dos átomos no cristal a ser estudado. A outra vantagem é a alta intensidade, que é importante principalmente em estudos de determinação da estrutura de um cristal.

1.1.2 Lei de Bragg

Se um feixe de raios X, com uma dada frequência, incidir sobre um átomo isolado sabe-se que os elétrons desse átomo serão excitados e vibrarão, emitindo raios X em todas as direções com a mesma frequência do feixe incidente [23]. Quando os átomos

estão regularmente espaçados em um reticulado cristalino e a radiação incidente tem comprimento de onda da ordem deste espaçamento, ocorrerá interferência construtiva em certas direções e interferência destrutiva em outras. A difração é um fenômeno que se relaciona na direção onde há interferência construtiva e destrutiva.

Para que as ondas refletidas interfiram construtivamente é necessário que a diferença de caminho entre os raios, incidentes e refletidos, seja um múltiplo inteiro do comprimento de onda λ da radiação monocromática incidente, satisfazendo a condição de Bragg

$$2 d_{hkl} \sin \theta = n\lambda. \quad (1.3)$$

onde n é inteiro. O ângulo θ que satisfaz essa condição é chamado de ângulo de Bragg e o número inteiro n de ordem de difração.

1.2 Teoria de espalhamento

1.2.1 Espalhamento por um elétron

Considere um elétron de carga $-e$ e massa m mantido na origem por uma pequena força restauradora. Uma onda plana de raios X monocromático pode ser representada pelo campo elétrico incidente:

$$\vec{E}_0 \exp[i\omega_0 t - i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}] \quad (1.4)$$

que atua sobre o elétron, \vec{E}_0 é o vetor campo elétrico incidente, \mathbf{k}_0 é o vetor de onda da onda incidente, enquanto que $\omega_0 = 2\pi\nu_0$, onde ν_0 é a frequência. Assumindo por simplicidade que a frequência natural do elétron é pequena comparada com a frequência do campo elétrico incidente de raios X. A força externa atuante no elétron é expressa por $-eE_0 e^{i\omega_0 t}$. Desde que a força restauradora seja pequena então, a força

imprimida no elétron será igual a:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -e E_0 e^{i\omega_0 t} \quad (1.5)$$

onde x é o deslocamento médio do elétron. A solução da equação diferencial do movimento é:

$$\vec{x} = \frac{e}{m\omega_0^2} \vec{E}_0 e^{i\omega_0 t} \quad (1.6)$$

O momento dipolar do elétron é $-ex$, ou seja:

$$\begin{aligned} -e\vec{x} &= \vec{p}_e e^{i\omega_0 t} \\ \vec{p}_e &= \frac{e^2}{m\omega_0^2} \vec{E}_0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

A polarizabilidade α_e , é por definição o momento de dipolo induzido por campo unitário.

$$\alpha_e = -\frac{e^2}{m\omega_0^2} \quad (1.8)$$

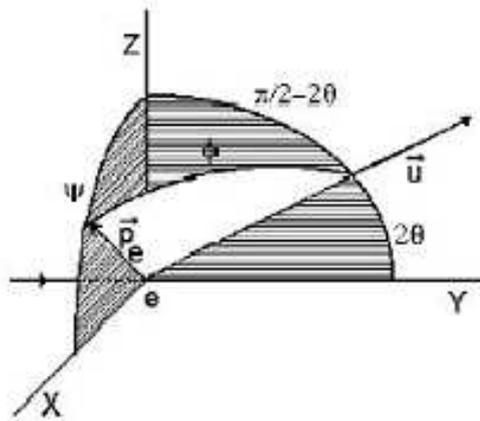


Figure 1.1: Raios X espalhados por um único elétron ref.[23]

De acordo com a teoria eletromagnética, um oscilador ou dipolo oscilante $p_e e^{i\omega_0 t}$ produz um campo eletromagnético. Os campos magnéticos e elétricos produzidos por esse dipolo, de acordo com Jackson[25], para grandes distâncias comparado com o comprimento de onda, são dados por:

$$e^{i\omega_0 t} \vec{H}_e = \vec{u} x \vec{p}_e \frac{\omega_0^2}{c^2 R} \exp[i\omega_0 t - 2\pi i \vec{k} \cdot \vec{R}] \quad (1.9)$$

$$e^{i\omega_0 t} \vec{E}_e = (\vec{u} x \vec{p}_e) x \vec{u} \frac{\omega_0^2}{c^2 R} \exp[i\omega_0 t - 2\pi i \vec{k} \cdot \vec{R}] \quad (1.10)$$

onde: $\vec{R} = R\vec{u}$ é o raio do vetor dipolo até o ponto de observação e $\vec{k} = \frac{1}{\lambda}\vec{u}$.

Essas equações representam ondas esféricas originadas pelo dipolo. A intensidade média no ponto de observação \vec{R} é dada por:

$$I_e = \frac{c}{8\pi} |\vec{E}_e|^2 \quad (1.11)$$

enquanto que a intensidade da onda incidente é:

$$I_0 = \frac{c}{8\pi} |\vec{E}_0|^2 \quad (1.12)$$

Substituindo o vetor de onda incidente e espalhado pelo elétron nas expressões da intensidade, teremos que evoluir a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} & \left| (\vec{u} x \vec{p}_e) x \vec{u} \frac{\omega_0^2}{c^2 R} \exp[i\omega_0 t - 2\pi i \vec{k} \cdot \vec{R}] \right|^2 = \\ & = \left| |\vec{u}| |\vec{p}_e| \sin \varphi \frac{\omega_0^2}{c^2 R} \exp[i\omega_0 t - 2\pi i \vec{k} \cdot \vec{R}] \right|^2 = |\vec{p}_e|^2 \sin^2 \varphi \left(\frac{\omega_0^2}{c^2 R} \right)^2 \end{aligned}$$

Como,

$$\vec{p}_e = -\frac{e^2}{m\omega_0^2} \vec{E}_0 \quad (1.13)$$

logo:

$$I_e = \left(\frac{e^2}{mc^2 R} \sin \varphi \right)^2 I_0 \quad (1.14)$$

Se a onda é não polarizada o ângulo φ , representado na figura 1.1, torna-se indeterminado e o termo $\sin^2 \varphi$ deve ser trocado pelo seu valor médio, ou seja:

$$\begin{aligned}
\overline{\sin^2 \varphi} &= 1 - \overline{\cos^2 \varphi} = 1 - \overline{\cos^2 \psi} \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} - 2\theta \right) \\
&= 1 - \overline{\cos^2 \psi} \sin^2(2\theta) \\
&= 1 - \frac{1}{2} (1 - \cos^2(2\theta)) \\
&= \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}
\end{aligned} \tag{1.15}$$

onde 2θ é o ângulo de espalhamento, ou seja, o ângulo entre a direção do feixe incidente e a direção do feixe espalhado. Portanto, a intensidade de espalhamento fica reduzida a seguinte expressão:

$$I_e = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2 R} \right)^2 \left(\frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2} \right) \tag{1.16}$$

onde $\frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}$ é o fator de polarização da onda espalhada por um elétron. Essa expressão nos mostra que a intensidade de espalhamento por um único elétron é independente da frequência de raios X.

1.2.2 Espalhamento elástico por duas partículas

Considere o espalhamento realizado por duas partículas, separadas pelo vetor \vec{r} , de um feixe de radiação com vetor de onda inicial \vec{k}_i e vetor da onda espalhada \vec{k}_s . A direção da onda muda, mas não o módulo de seu vetor de onda, ou seja, $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Os raios antes de atingirem as duas partículas estão com a mesma fase, mas percorrem caminhos ópticos diferentes, portanto emergem com fases diferentes. A primeira mudança de fase dada pela diferença de caminho $l_1 = r \cos \alpha$. A partir do produto escalar de \vec{k}_i por \vec{r} ,

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r} = |\vec{k}_i| \times r \times \cos \alpha = \frac{2\pi}{\lambda} r \cos \alpha, \tag{1.17}$$

obtem-se

$$l_1 = r \cos \alpha = \frac{\lambda}{2\pi} \times \vec{k}_i \cdot \vec{r} \quad (1.18)$$

Esta diferença de caminho fornece uma diferença de fase de $\frac{2\pi l_1}{\lambda} = \vec{k}_i \cdot \vec{r}$. A segunda mudança de fase é determinada pela diferença de caminho $l_2 = r \cos \beta$. A partir do produto escalar de \vec{k}_s por \vec{r} ,

$$\vec{k}_s \cdot \vec{r} = |\vec{k}_s| \times r \times \cos(180^\circ - \beta) = \frac{2\pi}{\lambda} r \cos \beta, \quad (1.19)$$

obté-m-se

$$l_2 = r \cos \beta = -\frac{\lambda}{2\pi} \times \vec{k}_s \cdot \vec{r}, \quad (1.20)$$

que fornece uma diferença de fase de $\frac{2\pi l_2}{\lambda} = -\vec{k}_s \cdot \vec{r}$. A diferença de fase total é a soma

$$\frac{2\pi l_1}{\lambda} + \frac{2\pi l_2}{\lambda} = (\vec{k}_i \cdot \vec{r}) - (\vec{k}_s \cdot \vec{r}) = (\vec{k}_i - \vec{k}_s) \cdot \vec{r} \quad (1.21)$$

A mudança de fase não depende de \vec{k}_i e \vec{k}_s separadamente, mas apenas da mudança no vetor de onda, dada por $\vec{G} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ que é chamado de vetor de espalhamento.

Se a onda espalhada pelo átomo que se encontra na origem tem equação

$$\Psi_1(\mathbf{x}) = \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{x}), \quad (1.22)$$

a onda espalhada pelo segundo átomo, que estará fora da fase, tem equação

$$\Psi_2(\vec{x}) = \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{x}) \times \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}). \quad (1.23)$$

O espalhamento total é determinado pela soma dos dois raios

$$\Psi_1(\mathbf{x}) + \Psi_2(\mathbf{x}) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}) \times (1 + \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})). \quad (1.24)$$

Assim, a amplitude do feixe espalhado é modificada pelo fator de fase

$$F(\mathbf{G}) = 1 + \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}), \quad (1.25)$$

onde o primeiro termo representa a contribuição do primeiro átomo e o segundo, a componente do segundo átomo.

Para relacionar \mathbf{G} a conceitos mais familiares em difração, nota-se que

$$|\mathbf{G}|^2 = |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s|^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_s \quad (1.26)$$

O ângulo entre \mathbf{k}_i e \mathbf{k}_s é ϕ portanto teremos:

$$\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_s = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \cos \phi$$

e, conseqüentemente,

$$|\mathbf{G}|^2 = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \cos \phi = \frac{8\pi^2}{\lambda^2}(1 - \cos \phi) = \frac{16\pi^2}{\lambda^2} \sin^2(\phi/2). \quad (1.27)$$

O ângulo $\phi/2$ é equivalente ao ângulo de Bragg θ . Assim,

$$|\mathbf{G}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \quad (1.28)$$

Quando se aplica esta equação ao **espalhamento de Bragg** para uma rede plana de espaçamento $d = (\lambda = 2d \sin \theta)$, tem-se $G = 2\pi/d$

1.2.3 Espalhamento elástico por um conjunto de partículas

A teoria desenvolvida acima pode ser facilmente generalizada para um conjunto de partículas espalhadoras, apenas somando-se as fases de cada partícula, com as posições de cada átomo com respeito a uma origem definidas como \mathbf{R}_j .

Assim,

$$F(\mathbf{G}) = \sum_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j). \quad (1.29)$$

A intensidade do feixe espalhado é dada por

$$I(\mathbf{G}) \propto |F(\mathbf{G})|^2 = \left| \sum_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \right|^2 = \sum_{i,j} \exp[i\mathbf{G} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)]. \quad (1.30)$$

Em uma experiência, o conhecimento das direções dos feixes incidente e espalhado fixa o valor de \mathbf{G} . É importante ressaltar os seguintes pontos:

- i- A intensidade contém informação sobre as separações de todos os pares de partículas, $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. A princípio esta informação pode ser extraída das medidas da intensidade sobre uma faixa extensa de valores de \mathbf{G} .
- ii- A intensidade é um valor real positivo, ao passo que a amplitude é um número complexo. Medindo-se intensidade ao invés de amplitude perde-se toda a informação sobre a fase desta amplitude, portanto, não se pode reconstruir a amplitude a partir das medidas da intensidade. A amplitude contém a informação sobre as posições das partículas e estas informações não podem ser extraídas diretamente das medidas da intensidade.

Finalmente, é preciso levar em conta as situações onde há tipos diferentes de partículas. Cada partícula espalhará o feixe de radiação de um modo diferente. Isto é considerado através do peso das componentes da amplitude:

$$F(\mathbf{G}) = \sum_j f_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (1.31)$$

O fator f_j é chamado por uma variedade de nomes como, fator de espalhamento ou fator de forma. Em espalhamento de raios X, onde se considera o espalhamento pelos átomos, o fator f_j é chamado “ fator de espalhamento atômico dos raios X”.

1.2.4 Espalhamento por uma distribuição contínua de matéria

Para desenvolver a teoria para uma distribuição contínua de matéria, tal como para a distribuição eletrônica ao redor de um átomo, é necessário considerar o espalhamento por um pequeno elemento de volume.

Definindo a origem como o centro do átomo, o espalhamento do feixe de radiação será dado por um elemento de volume pequeno dV na posição \mathbf{r} . A densidade de partículas neste elemento de volume é $\rho(\mathbf{r})$. Assim, a amplitude de espalhamento pelo elemento de volume será

$$dF(\mathbf{G}) = \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) dV \quad (1.32)$$

Para obter o espalhamento de toda distribuição, simplesmente integra-se sobre todo o volume. Denotando-se $dV = d\mathbf{r}$,

$$F(\mathbf{G}) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.33)$$

O resultado importante é que a amplitude de espalhamento fornece a informação sobre a dependência espacial da matéria.

1.2.5 Fator de espalhamento atômico dos raios X

Os raios X são espalhados pelos elétrons. Quando se considera o espalhamento dos raios X pelos átomos, pode-se pensar o espalhamento por uma distribuição contínua de elétrons ao redor do átomo. Se a densidade eletrônica é escrita como $\rho_{el}(\mathbf{r})$, o fator de espalhamento atômico dos raios X é dado por

$$f(\mathbf{G}) = \int \rho_{el}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.34)$$

No limite de \mathbf{G} tendendo à zero, o que corresponde a raios X espalhados sem deflexão, pode-se obter como resultado

$$f(\mathbf{G} = \mathbf{0}) = \int \rho_{el}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = Z,$$

onde Z é o número total de elétrons no átomo ou íon. Para todos os átomos e íons de interesse, $\rho_{el}(\mathbf{r})$ pode ser calculado usando-se a mecânica quântica. Na prática não haverá uma função analítica para $f(\mathbf{G})$. Sendo assim, para propósitos de uso prático, os valores numéricos de $f(\mathbf{G})$ serão dados por uma forma funcional apropriada.

Considere, neste ponto, um exemplo algébrico muito simples em uma dimensão. Suponha que a densidade de carga seja uma função do tipo “fenda”, assim chamada porque representa uma abertura em difração óptica.

Isto é definido como $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$.

Neste caso, o fator de espalhamento correspondente é

$$f(G) = \int \rho(x) \exp(iGx) dx = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \cos(Gx) dx = \frac{\sin(Ga)}{Ga} \quad (1.35)$$

Esta função é chamada “função *sinc*” e tem valor 1 quando Ga tende à zero, e cai ao valor $1/2$ quando Ga se aproxima de 1,8955. Assim, $1/a$ é definido como a largura da função de espalhamento: quanto mais amplo o objeto inicial mais estreito, em G , será a função de espalhamento.

As mesmas características ocorrem quando se considera uma função que varia continuamente, por exemplo:

$$\rho(x) = \frac{1}{a} \exp(-|x|/a),$$

que fornece

$$f(G) = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^0 \exp(x/a) \exp(iGx) dx + \frac{1}{a} \int_0^{\infty} \exp(-x/a) \exp(iGx) dx = \frac{1}{1 + (Ga)^2} \quad (1.36)$$

Esta função cai ao valor $1/2$ quando $Ga = 1$.

Aplicando estas idéias para a função de espalhamento de raios X, sua largura é dada pelo inverso do raio atômico/iônico.

1.2.6 Análise de Fourier

Uma transformada de Fourier é uma extensão da série de Fourier. Em uma série de Fourier uma função periódica $f(x)$ com período a é analisada em termos de uma superposição de ondas,

$$f(x) = \sum_n A_n \exp \left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda_n} + \varphi_n \right) \right], \quad (1.37)$$

onde cada onda tem amplitude A_n , fase relativa φ_n , comprimento de onda $\lambda_n = a/n$ e, conseqüentemente, vetor de onda $k_n = 2\pi/\lambda_n = 2\pi n/a$. Numa transformação de Fourier representa-se uma função em termos de uma superposição de ondas. Neste caso, sendo a função não periódica, todos os comprimentos de onda contribuem com termos na superposição. Pode-se pensar em uma transformada de Fourier como uma análise de Fourier de uma função periódica onde o período é infinito, significando que há uma diferença infinitesimalmente pequena entre qualquer k_n e k_{n+1} . Assim, a soma sobre todos os valores de n e conseqüentemente k pode ser substituída por uma integral sobre valores contínuos de k . Nesta seção, k será usado como a forma unidimensional do vetor de espalhamento \mathbf{G} .

1.2.7 Equação básica

A transformada de Fourier em uma dimensão é definida como

$$g(k) = \int f(x) \exp(ikx) dx \quad (1.38)$$

e seu inverso como

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int g(k) \exp(-ikx) dx \quad (1.39)$$

Aplicando esta definição na difração de raios X, a amplitude do sinal espalhado passa a ser dada pela transformada de Fourier da densidade eletrônica. A partir de medidas das intensidades de raios X sobre uma ampla faixa de vetores de espalhamento, pode-se reconstruir a densidade eletrônica através da transformada de Fourier inversa.

Segue das definições anteriores que

$$g(0) = \int f(x)dx \quad \text{e} \quad f(0) = \frac{1}{2\pi} \int g(k)dk. \quad (1.40)$$

1.2.8 Partículas pontuais

Um ponto pode ser descrito por uma função matemática especial que define a densidade infinitesimal de uma partícula pontual. A função delta de Dirac é definida pelas seguintes propriedades

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \begin{cases} 0, & \text{se } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}_j, \\ \infty, & \text{se } \mathbf{r} = \mathbf{r}_j, \end{cases}$$

$$\int \delta(\mathbf{r})d(r) = 1 \quad (1.41)$$

Neste caso, a partícula só está definida em uma posição, de forma que a função deva ser zero em todos os outros pontos. Porém, a integral da densidade fornece a probabilidade de se encontrar a partícula em algum lugar e assim a integral deve ser igual a um. Se a densidade de partículas na amostra de volume V é tal que há uma partícula em cada ponto \mathbf{r}_j do volume, isto é

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (1.42)$$

tem-se que

$$F(\mathbf{G}) = \frac{1}{V} \sum_j \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})d\mathbf{r} = \sum_j \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (1.43)$$

resultado este já derivado anteriormente, na equação.

1.2.9 Teorema da convolução

A vantagem da utilização da transformada de Fourier está no uso da propriedade de convolução. A partir de duas funções $g(x)$ e $h(x)$, pode-se produzir uma terceira função definida como a convolução destas duas funções:

$$f(x) = g(x) \otimes h(x) = \int g(x')h(x - x')dx' \quad (1.44)$$

A idéia básica é que se inicia com uma função $h(x)$ e a cada ponto x estabelece-se a função $g(x')$ centrada em x com peso dado por $h(x)$. Isto é repetido para todo x , e todas as operações são somadas. Considerando que as funções são contínuas em x , a soma sobre todas estas operações é substituída por uma integral, como descrito acima.

Se a transformada de Fourier das três funções são escritas como $F(k)$, $G(k)$ e $H(k)$, tem-se a relação básica

$$F(k) = \int (g(x) \otimes h(x)) \exp(ikx)dx = G(k) \times H(k). \quad (1.45)$$

1.2.10 Transformadas de estruturas cristalinas

Pode-se modelar uma estrutura cristalina em termos de quatro convoluções:

Estrutura cristalina = rede \otimes célula unitária \otimes elétrons atômicos \otimes agitação térmica

Quando se toma a transformada de Fourier da estrutura cristalina, as convoluções transformam-se em produtos das transformadas de Fourier individuais. Então, para construir a transformada de Fourier da estrutura cristalina pode-se tratar cada transformada de Fourier separadamente.

1.3 Método do Pó

1.3.1 Introdução

Este método foi desenvolvido[26] pelo cientista holandês P. Debye e pelo suíço P. Sherrer, em 1916, e, independentemente, pelo norte-americano A. Hull em 1917. É utilizada uma amostra reduzida a pó que se coloca no centro de uma câmara cilíndrica, no trajeto de raios X monocromáticos. O pó é, habitualmente, colocado dentro de um pequeno tubo de material amorfo e a montagem é, normalmente giratório. O tempo de exposição aos raios X depende de vários fatores, designadamente, das dimensões da câmara e da abertura de entrada do feixe incidente e ainda da composição da amostra.

Quando o feixe monocromático de raios X incide no pó cristalino, dada a distribuição aleatória dos inúmeros pequenos grãos, qualquer plano reticular assume todas as orientações possíveis, relativamente ao feixe incidente. Desse modo, ocorre sempre uma incidência segundo um ângulo tal que satisfaça a condição de Bragg. Com outras palavras, é possível registrar todas as direções hkl estruturalmente possíveis, desde que suficientemente intensas.

Em consequência da distribuição estatística das diferentes orientações assumidas por um dado plano reticular, verifica-se que há sempre um desses planos em condições de refletir a radiação incidente. Assim, em termos de rede recíproca, a pulverização do cristal corresponde a uma rotação dos nós recíprocos em torno da origem, de modo que cada um deles define uma superfície esférica: o espaço recíproco deixa de ser uma simples distribuição triperiódica de pontos para se transformar num conjunto de superfícies esféricas concêntricas. As interseções destas superfícies pela esfera de Ewald são circunferências, cujos centros se situam ao longo da direção do feixe de raios X incidentes. Essas circunferências correspondem as observadas no diagrama de pó, pois cada um dos seus pontos define um centro da esfera de Ewald em uma direção

de máximo de difração.

1.3.2 Uso do método do pó

Listamos abaixo[27] alguns dos usos específicos do método:

a)- Identificação de fases em materiais minerais, químicos, cerâmicos ou outros materiais de engenharia.

b)- Identificação de múltiplas fases em misturas cristalina.

c)- Determinação da estrutura cristalina de materiais.

d)- Identificação e análise estrutural de minerais.

e)- Reconhecimento de materiais amorfos em misturas cristalinas.

f)- Análise da estrutura cristalográfica e cálculo da célula unitária em materiais cristalinos.

g)- Determinação quantitativa da soma de diferentes fases em misturas pelo calculo das proporções dos picos.

h)- Determinação quantitativa de fases por refinamento completo do difratograma, "whole-pattern".

i)- Determinação do tamanho do cristalito pela análise da largura dos picos.

j)- Determinação da forma do cristalito pelo estudo da simetria dos picos.

k)- Estudo da expansão térmica em estrutura cristalina usando equipamento "in-situ heating".

1.3.3 Distorções Anisotrópicas em picos padrões

Os materiais policristalinos[28] são constituídos de pequenos cristais, denominados grãos ou cristalitos, os quais são separados uns dos outros por fronteiras denominadas contornos de grão.

Cada grão em um agregado policristalino tem orientação cristalográfica diferente

dos seus vizinhos. Consideradas de modo global, as orientações de todos os grãos podem tanto estarem distribuídas aleatoriamente com relação a um sistema de referência como estarem concentradas, em maior ou menor grau, ao redor de alguma ou de algumas orientações particulares. Nesta última condição, o agregado policristalino apresenta orientação preferencial ou textura.

O método do pó tem como princípio que a distribuição dos cristalitos é completamente aleatória. Em geral, a situação mais desejada é quando uma amostra tenha orientações completamente aleatórias de pequenos cristalitos. Alguns tipos de análise fazem uso da orientação preferencial desses cristalitos, e outros tipos de análise (identificação qualitativa de fases) a orientação preferencial pode ser calculado e trabalhado para produzir um resultado útil para a análise.

1.3.4 Orientação Preferencial

Vários materiais exibem orientações preferenciais. Alguns tipos de cerâmicas magnéticas, fio extrudado, pó prensado e vários filmes e polímeros requerem manipulação e medida da orientação preferencial. Frequentemente essas medidas envolvem o uso de um difratômetro de figura de pólo para medir um ângulo de difração.

Em geral, nos dados da difração do pó, a orientação preferencial é a causa mais provável da diferença dos dados experimentais com o padrão de intensidade para a fase analisada. O estudo da orientação preferencial é útil para determinar a anisotropia de uma amostra, mas é muito difícil obter resultado satisfatório, quando faz uma análise quantitativa ou um preciso cálculo da célula unitária.

O caminho mais utilizado no estudo da orientação preferencial em um material de composição conhecida é comparar com as intensidades de uma amostra que tem orientação preferencial com o padrão para o material. Alguns programas de análise de dados ajustam os dados corretos para o estudo da orientação preferencial, quando

o objetivo é fazer uma análise quantitativa.

1.3.5 Tensão Residual e Deformação

Deformação em um material pode produzir dois tipos de efeito na difração. Se a deformação é uniforme (expansão ou contração) é chamado de macrotensão e há um deslocamento dos máximos de difração em comparação com um padrão. Macrodeformação causa variação no parâmetro de rede, resultando em um desvio do pico.

Microdeformação é produzida por uma distribuição de forças de tração ou compressão resultando em um alargamento nos picos de difração. Em alguns casos, alguns picos assimétricos podem ser resultado de microdeformação. Dislocações e vacâncias podem ocasionar microtensão em cristalitos e o efeito geralmente será uma distribuição de picos em volta do pico sem tensão e um alargamento do pico padrão. Esses efeitos são demonstrados, de uma maneira geral, na figura a seguir.

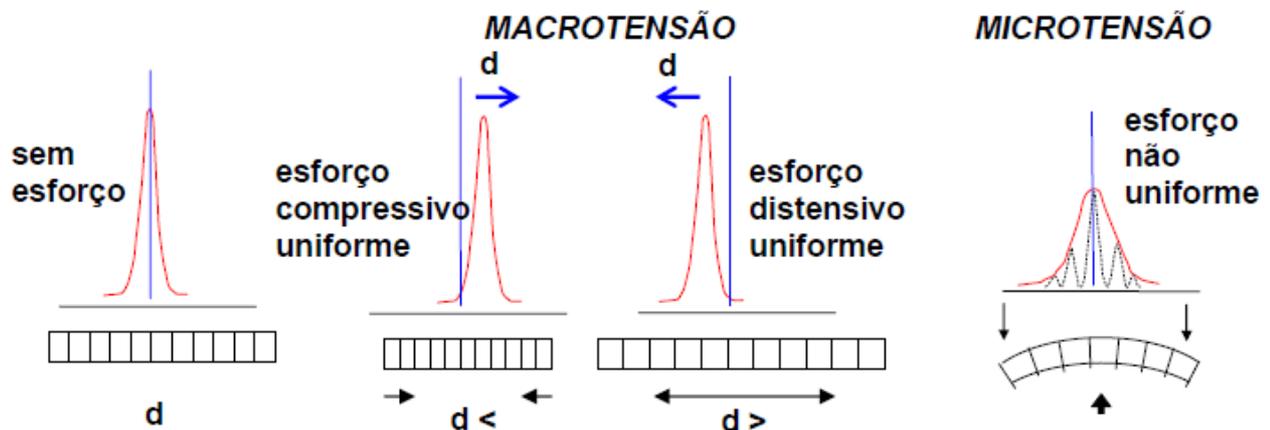


Figure 1.2: Deformação por expansão ou contração dos valores de d
ref.[5]

Capítulo 2

A teoria da elasticidade linear

2.1 Introdução

Elasticidade linear é uma teoria da física que estuda o comportamento de corpos materiais que se deformam ao serem submetidos a ações externas (forças devidas ao contato com outros corpos, ação gravitacional agindo sobre sua massa, etc.), retornando à sua forma original quando a ação externa é removida, não alterando, portanto, o volume do material. Até um certo limite, que depende do material e da temperatura, as tensões aplicadas são aproximadamente proporcionais às deformações.

As equações da teoria linear da elasticidade [29] no sistema de coordenadas retangulares cartesianas (x_1, x_2, x_3) incluem as seguintes equações:

$$\sigma_{ij,j} - \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} + F_i = 0 , \quad (2.1)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$; que é a equação de movimento do sistema físico sob consideração;

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl} \varepsilon_{kl} , \quad (2.2)$$

onde $i, j, k, l = 1, 2, 3$; que é a Lei de Hooke Generalizada;

$$2\varepsilon_{kl} = u_{l,k} + u_{k,l} , \quad (2.3)$$

que é a Fórmula de Cauchy que expressa a deformação através do deslocamento.

Nas equações (2.1) a (2.3), $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ são as componentes do tensor simétrico das tensões, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ são as componentes do tensor das deformações, Λ_{ijkl} são as componentes do tensor de ordem quatro do modulo da elasticidade, u_i são as componentes do vetor deslocamento, F_i são as componentes da força volumétrica, ρ é a densidade constante do material, e t é o tempo. A vírgula na frente de um sub-escrito indica diferenciação com respeito à coordenada espacial marcada pelo sub-escrito; letras repetidas no sub-escrito indicam soma sobre seus valores admissíveis.

A teoria da elasticidade estuda de forma rigorosa a determinação das tensões, deformações e da relação entre elas para um material. Neste trabalho estudamos a relação entre deformação e tensão dada pela lei de Hooke Generalizada. Nosso objetivo, portanto, foi o de determinar as constantes do tensor de elasticidade para um material com simetria ortotrópica. A partir dessa determinação, obtemos um modelo para determinar as tensões residuais em um material ortotrópico.

2.2 Diagrama Tensão-Deformação

Uma das mais importantes propriedades mecânicas dos materiais é obtida no ensaio de tração [30]. Neste ensaio submete-se uma amostra do material a uma força axial continuamente crescente até se dar a fratura. Registram-se durante o ensaio a força e o aumento do comprimento relacionado com a deformação da amostra e obtem-se o diagrama tensão-deformação. Neste diagrama é relacionada a tensão média (σ) em função da deformação nominal (ε). A tensão média é definida como a força aplicada (F) dividida pela área inicial (A_0) da seção transversal da amostra. A deformação

nominal (ε) representa a variação de comprimento sofrida pela amostra dividida pelo comprimento de deformação:

$$\sigma = \frac{F}{A} \qquad \varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \qquad (2.4)$$

em que l_0 é o comprimento inicialmente definido na amostra e l o comprimento instantâneo que vai aumentando continuamente durante o ensaio, sendo que a tensão média tem dimensões de força por unidade de área e a deformação é uma grandeza adimensional. Seja um diagrama tensão-deformação representado na Figura 2.1[30].

A região OA é a região elástica. O ponto A é o *limite elástico* que se define como a maior tensão que o material pode suportar sem sofrer uma deformação permanente quando a força for retirada. A determinação do limite elástico é bastante difícil e demorada, depende da sensibilidade do instrumento de leitura. Por esse motivo substituiu-se muitas vezes esta quantidade pelo limite de proporcionalidade, definido pelo ponto A' , que é a tensão para a qual a curva tensão-deformação se desvia da relação linear. Continuando a tensionar o material para além do ponto A' , no caso da figura, a curva se desvia acentuadamente da linearidade. Entra-se no domínio plástico do material e se for retirada a tensão em qualquer ponto da curva nessa região (por exemplo, no ponto B da Figura 2.1a sofre um aumento de comprimento permanente definido pela deformação OB'). Se a deformação OB' for igual a 0,002 da tensão correspondente ao ponto B denomina-se *tensão de cedência*, σ_c , que para efeitos práticos caracteriza o início da deformação plástica segundo os critérios em vigor nas normas de ensaios de materiais. A *tensão de cedência* é a tensão que produz uma pequena quantidade de deformação permanente. O limite elástico é o valor mais elevado de tensão que o material pode suportar sem obter uma deformação mensurável após a retirada da carga. Na curva representada na Figura 2.1a a deformação plástica prossegue para além do ponto A' à carga crescente, atingindo o ponto C em que a carga atinge um

valor máximo. A tensão correspondente a esse ponto é a *resistência a tração* do material, σ_r , que é maior tensão que o material pode suportar antes da ruptura. A partir do ponto C a carga decresce dando-se finalmente a ruptura no ponto D.

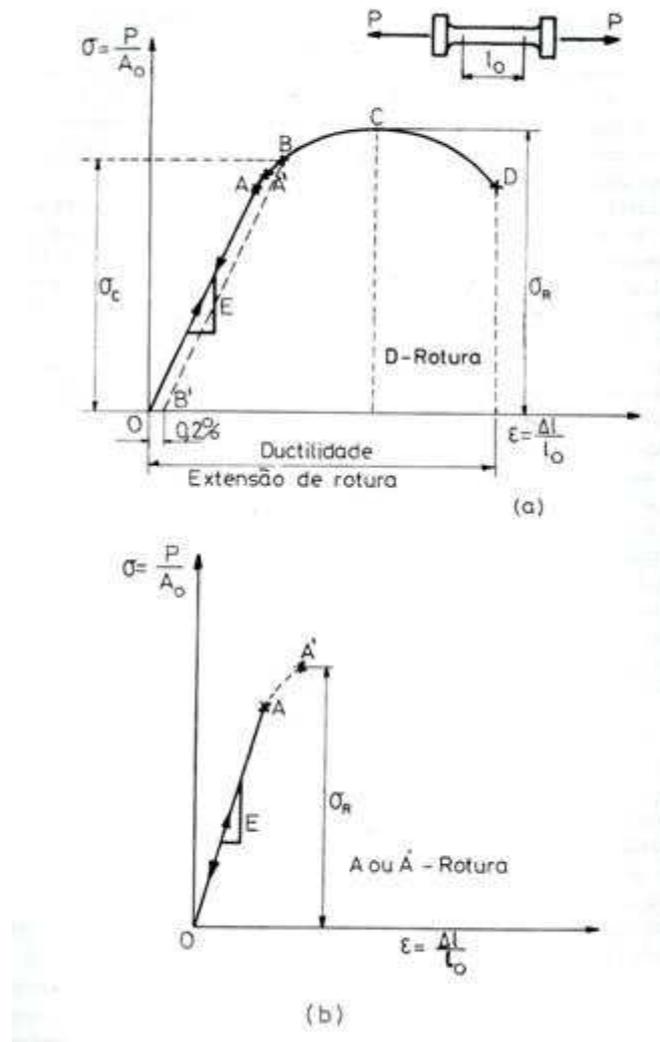


Figure 2.1: Diagrama do ensaio de tração: (a) Material dúctil; (b) Material frágil ref. [30].

2.3 Deformação Volumétrica

Em geral, a deformação de um sólido envolve a combinação da variação do volume e da variação da forma de uma amostra. Dessa maneira, para um estado dado de deformação, devemos conhecer as contribuições das variações do volume e da forma.

No desenvolvimento desse trabalho, assumiremos o domínio das pequenas deformações, nas quais somente o volume da amostra será modificado.

A deformação volumétrica é a variação de volume por unidade de volume [31].

$$\Delta = \frac{V_f - V_0}{V_0} = \frac{\Delta V}{V_0}, \quad (2.5)$$

onde V_f e V_0 são o volume final e inicial do elemento de volume.

Como é conhecido, a variação do volume é dada por:

$$\Delta \mathbf{V} = \mathbf{l}'_1 (\mathbf{l}'_2 \times \mathbf{l}'_3) - \mathbf{l}_1 (\mathbf{l}_2 \times \mathbf{l}_3). \quad (2.6)$$

Usando a interpretação geométrica da deformação normal, os novos comprimentos de um paralelepípedo retangular podem ser escritos como:

$$\begin{aligned} dx'_1 &= dx_1(1 + \varepsilon_{xx}), \\ dx'_2 &= dx_2(1 + \varepsilon_{yy}), \\ dx'_3 &= dx_3(1 + \varepsilon_{zz}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde $\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}$ são as deformações nas direções x, y e z, respectivamente.

Então, a variação de volume fica:

$$dx'_1 dx'_2 dx'_3 - dx_1 dx_2 dx_3 = dx_1 dx_2 dx_3 (1 + \varepsilon_{xx}) \cdot (1 + \varepsilon_{yy}) \cdot (1 + \varepsilon_{zz}) - dx_1 dx_2 dx_3.$$

Os produtos das deformações são negligenciados, portanto, para pequenas deformações, teremos [32]:

$$(1 + \varepsilon_{xx})(1 + \varepsilon_{yy})(1 + \varepsilon_{zz}) \cong 1 + (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.8)$$

Substituindo esses valores na equação (2.5), tem-se que:

$$\frac{dx'_1 dx'_2 dx'_3 - dx_1 dx_2 dx_3}{dx_1 dx_2 dx_3} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}. \quad (2.9)$$

A variação de volume por unidade de volume em um ponto é a soma das deformações normais.

2.4 A Lei de Hooke Generalizada

2.4.1 Introdução

No desenvolvimento de um modelo teórico fenomenológico, a utilização de relações constitutivas tem um papel fundamental. Elas permitem caracterizar o estado macroscópico do sistema físico a partir de procedimentos experimentais. Relação constitutiva é uma relação entre duas grandezas físicas que é específica de um material [33, 34].

As relações constitutivas são particulares para cada material e servem para classificar os diversos materiais conforme seu comportamento. As equações constitutivas mecânicas, que classificam materiais da engenharia, por exemplo, relacionam as tensões com alguma medida do movimento do corpo, normalmente a deformação ou a taxa de deformação. Há muitas outras categorias de equações constitutivas, como as que relacionam tensões com deformações e temperaturas, com campos elétricos ou

magnéticos, a lei de Ohm, a lei que rege a força de atrito e a lei que rege a elasticidade linear (lei de Hooke).

Uma relação linear mais geral entre os tensores deformação e tensão é a *lei de Hooke generalizada* que estabelece a proporcionalidade entre as grandezas tensão e deformação, representada na forma tensorial por:

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (2.10)$$

onde σ_{ij} , ε_{kl} e Λ_{ijkl} são representadas pelo tensor das tensões, tensor da elasticidade e o tensor das deformações, respectivamente.

2.4.2 Tensor das tensões

Conceito de tensão no ponto

Consideremos um sólido elástico contínuo sob a ação de forças exteriores seguindo um modelo de contração volumétrica durante a deformação (pequenas deformações). Tem-se que o sólido está em equilíbrio estático [30], força e torque resultante iguais a zero, representado na figura 2.2, verifica-se que em geral a força não estará uniformemente distribuída ao longo da seção transversal ab apresentada na figura 2.2a e que pertence ao plano π . Se a parte 1 do sólido é retirada, pelo princípio de ação e reação essa tensão pode ser substituída pelo sistema de forças externas em ab que mantenham cada ponto na parte 2 do sólido na mesma posição anterior à remoção da parte 1 do sólido representado na figura 2.2b. Sendo ΔA o elemento de área existente no ponto 0 e $\overrightarrow{\Delta F}$ a força interna resultante do equilíbrio de forças criado nessa área, a tensão no elemento de área, considerado será:

$$\overrightarrow{S} = \frac{\overrightarrow{\Delta F}}{\Delta A} \quad (2.11)$$

A tensão \overrightarrow{S} é portanto um vetor que tem a mesma direção e sentido de $\overrightarrow{\Delta F}$ con-

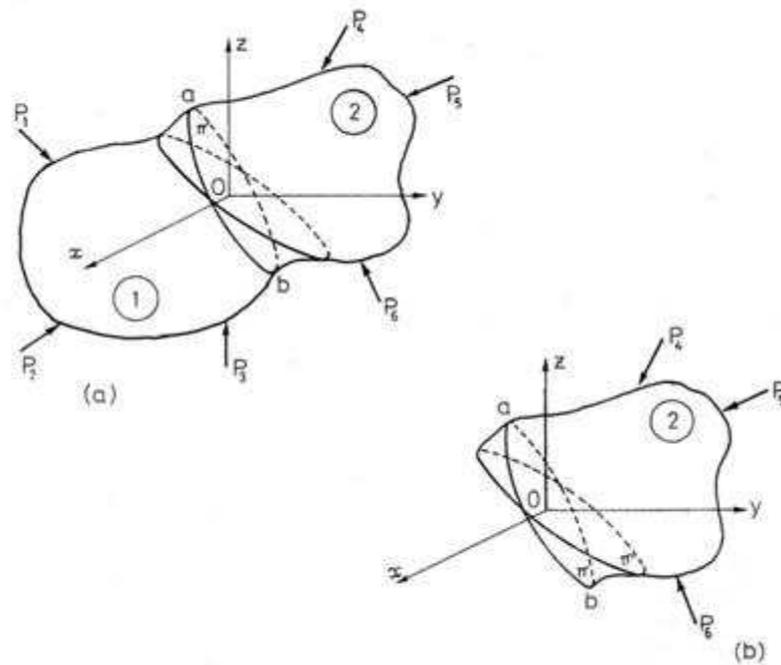


Figure 2.2: Conceito de tensão no ponto de um sólido [30].

siderado constante no elemento de área e que representa no elemento de área ΔA a intensidade da reação do material da parte esquerda do plano π sobre a sua parte direita. Se a área ΔA for reduzida continuamente para zero, o valor limite da razão $\frac{\overrightarrow{\Delta F}}{\Delta A}$ é a tensão no ponto 0 no sólido 2, ou seja:

$$\vec{S} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\overrightarrow{\Delta F}}{\Delta A} \quad (2.12)$$

A tensão estará na direção da força resultante \vec{F} que está geralmente inclinada em relação a ΔA . Obtém-se a mesma tensão no ponto 0 do plano π se o diagrama de corpo livre fosse construído retirando a parte 2 do sólido. Contudo, a tensão seria diferente para qualquer outro plano que passe pelo ponto 0, como é o caso do plano π' da figura 2.2b. Para haver equilíbrio de forças em qualquer plano da peça é necessário que as tensões que se desenvolvem nesse plano na direção da força aplicada sejam tais

que se verifique a equação seguinte:

$$\vec{F} = \int_A \vec{S} dA \quad (2.13)$$

em que A é a área do plano considerado e \vec{S} as tensões em cada ponto do plano na direção da força \vec{F} . A equação 2.13 representa que numa dada seção a força será a integral da distribuição de tensões nessa seção, desde que \vec{F} e \vec{S} coincidam em direção e sentido.

Tipos de tensão e notação das tensões num elemento tridimensional

A definição de tensão dada na seção anterior implica que no elemento de área dA a tensão esteja na direção da força resultante \vec{F} que no caso mais geral estará inclinada em relação a dA . Não se torna, no entanto, prático utilizar uma tensão que faz um determinado ângulo com a área em que atua. Neste caso, a tensão total S pode ser decomposta em duas componentes: uma tensão normal (σ) que atua perpendicularmente a dA e uma outra denominada tensão de corte (τ) que existe no plano ab 2.3.

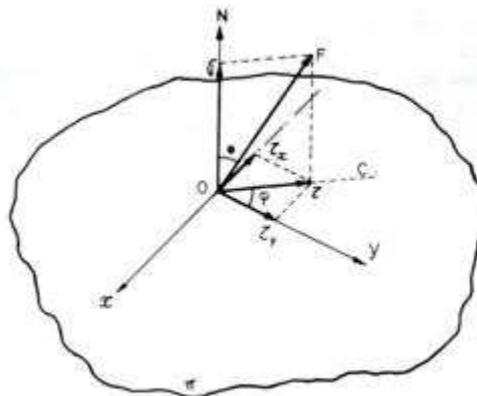


Figure 2.3: Decomposição da tensão total nas suas componentes no plano [30].

Para se tornar este ponto mais claro considere-se a figura 2.3 em que a força \vec{F} faz um ângulo θ com a normal \vec{N} ao plano π com área A . Por outro lado, o plano

que contém a normal e F intersecta o plano π segundo uma linha tracejada que faz um ângulo ϕ com o eixo y . (Linha OC na figura 2.3). A tensão normal é dada por:

$$\sigma = \frac{F}{A} \cos \theta \quad (2.14)$$

A tensão de cisalhamento no plano atua segundo a linha OC e o seu valor é:

$$\tau = \frac{F}{A} \sin \theta \quad (2.15)$$

Esta tensão de cisalhamento pode ser decomposta em componentes paralelas às direções x e y existentes no plano: direção x

$$\tau_x = \frac{F}{A} \sin \theta \sin \phi \quad (2.16)$$

direção y

$$\tau_y = \frac{F}{A} \sin \theta \cos \phi \quad (2.17)$$

Conclui-se, portanto, que num plano qualquer poderá haver uma tensão normal e duas tensões de cisalhamento. No caso mais geral tridimensional, a tensão resultante \vec{S} no ponto A pode ser decomposta nas tensões que atuam nas faces do elemento de volume representado na figura 2.4 e que está orientado segundo um sistema de eixos ortogonais $[Oxyz]$. Estas tensões estão representadas por um conjunto de dois índices em que o primeiro índice indica a direção da normal ao plano em que atua a tensão e o segundo a tensão que exerce. Assim, por exemplo, a tensão que atua perpendicularmente às faces $DCGH$ e $ABFE$ será indicada por σ_x (tensão segundo o eixo dos x atuando numa face perpendicular ao mesmo eixo). Além das tensões diretas, atuam também tensões de cisalhamento sobre os respectivos planos com duas componentes em cada plano, como já se verificou. Nesta notação a tensão de corte τ_{xy} é a tensão na direção Y atuando num plano perpendicular ao eixo dos x .

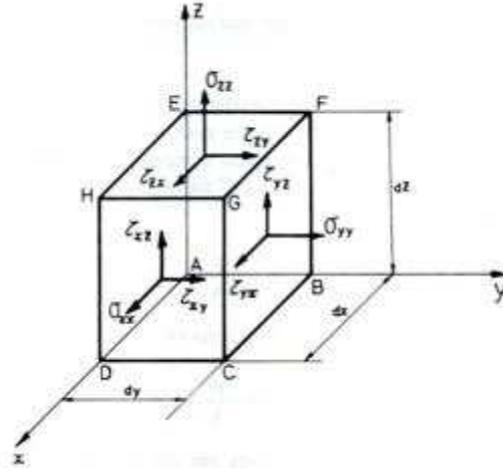


Figure 2.4: Representação das tensões e respectiva notação num elemento tridimensional [30].

O elemento representado na figura tem lados com dimensões infinitesimais dx , dy , dz , encontrando-se o elemento em equilíbrio de tensões. Este elemento representa o estado de tensões no ponto A, considerando que se despreza a variação das tensões ao longo de suas faces. Aqui é assumido que somente o volume da amostra é modificado, deixando o elemento infinitesimal invariante de forma. No entanto, para haver equilíbrio não pode haver rotação e portanto os momentos de todas as forças devem anular-se. Considerando assim a rotação do elemento em relação ao eixo dos z e calculando os momentos em relação a esse eixo, vem:

$$\begin{aligned}
 & (\sigma_{xx} dy dz \frac{dy}{2} - \sigma_{xx} dy dz \frac{dy}{2}) + (\sigma_{yy} dx dz \frac{dx}{2} - \sigma_{yy} dx dz \frac{dx}{2}) + \\
 & + (\tau_{xy} dy dz dx - \tau_{yx} dy dz dx) + (\tau_{zy} dy dx \frac{dx}{2} - \tau_{zy} dy dx \frac{dx}{2}) + \\
 & + (\tau_{zx} dy dz \frac{dy}{2} - \tau_{zx} dy dx \frac{dy}{2}) = 0 \quad (2.18)
 \end{aligned}$$

Resolvendo (2.18) teremos:

$$\tau_{xy} - \tau_{yx} = 0 \quad \rightarrow \quad \tau_{xy} = \tau_{yx} \quad (2.19)$$

Calculando de maneira análoga os momentos em relação ao eixo dos y e x , respecti-

vamente, $\tau_{xz} = \tau_{zx}$ e $\tau_{yz} = \tau_{zy}$. Portanto no caso tridimensional, suas componentes podem ser representadas por uma matriz onde as diagonais σ_{ii} são chamadas tensões normais e os componentes não diagonais são chamadas de tensões de cisalhamento ou tangenciais. Então:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{yx} & \tau_{zx} \\ \tau_{xy} & \sigma_{yy} & \tau_{zy} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

2.4.3 Tensor deformação

A figura 2.5 representa de forma esquemática um corpo deformável sujeito a um sistema de forças. Um elemento infinitesimal de volume $dx dy dz$ desse corpo após a aplicação das forças P_i ($i=1,2,3,4$) sofre um deslocamento e uma deformação. Sejam $P(x, y, z)$ e $Q(x + dx, y + dy, z + dz)$ dois pontos em vértices opostos do elemento em estudo e ainda outros vértices vizinhos de P, $L(x+dx, y, z)$; $M(x, y+dy, z)$ e $N(x, y, z+dz)$ que após a deformação passaram para as posições P' , Q' , L' , etc.

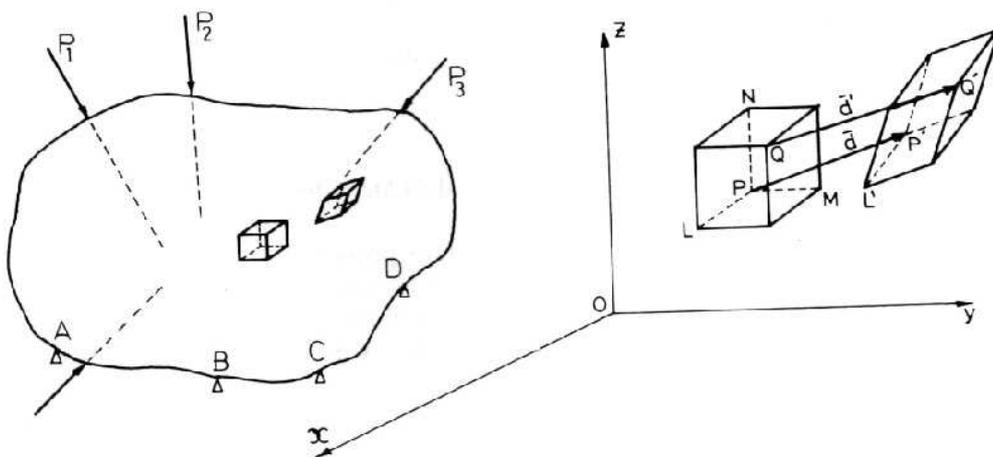


Figure 2.5: Deformação e deslocamento de um elemento de volume de um corpo sujeito a um sistema de forças [30].

Seja $\vec{d}(u, v, w)$ o deslocamento de P ($\vec{d} = P' - P$) e $\vec{d}'(u', v', w')$ o deslocamento de Q ($\vec{d}' = Q' - Q$). Virá então:

$$\begin{aligned} d'(u + du, v + dv, w + dw) = & \left(u + \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz; v + \frac{\partial v}{\partial x} dx \right. \\ & \left. + \frac{\partial v}{\partial y} dy + \frac{\partial v}{\partial z} dz; w + \frac{\partial w}{\partial x} dx + \frac{\partial w}{\partial y} dy + \frac{\partial w}{\partial z} dz \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Isto é $P'(x+u, y+v, z+w)$ e $Q'[(x+dx+u+du), (y+dy+v+dv), (z+dz+w+dw)]$

Esta é a expressão geral das coordenadas de um ponto Q' qualquer proveniente da deformação de um segmento PQ. Em particular, um ponto L' que veio do segmento PL orientado segundo x:

$L'[(x + dx + u + du), (y + v + dv), (z + w + dw)]$ ou seja:

$$L'[(x + dx + u + \frac{\partial u}{\partial x} dx), (y + v + \frac{\partial v}{\partial x} dx), (z + w + \frac{\partial w}{\partial x} dx)]$$

e de modo análogo para M' e N'. Por definição, a deformação linear na direção do eixo x é:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{[(L' - P') - (L - P)]_x}{dx} \quad (2.22)$$

Segundo apenas a direção x.

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.23)$$

De modo análogo, as outras deformações lineares segundo y e z são, respectivamente:

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \text{ e } \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

A deformação pura de um segmento é então caracterizada por um alongamento ou encurtamento linear entre os seus pontos extremos e por uma distorção angular. A figura 2.5 representa um segmento PQ no espaço cujo comprimento é ds e que sofreu um deslocamento para P'Q'. Se for $\vec{d}(u, v, w)$ o deslocamento do ponto P, o deslocamento do ponto Q será $\vec{d}'(u + du, v + dv, w + dw)$. As componentes do vetor incremento de deslocamento serão, em geral:

$$\begin{aligned}
du &= \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz \\
dv &= \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy + \frac{\partial v}{\partial z} dz \\
dw &= \frac{\partial w}{\partial x} dx + \frac{\partial w}{\partial y} dy + \frac{\partial w}{\partial z} dz
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Na representação matricial da deformação [32]

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \tag{2.25}$$

Que é matriz simétrica, considerando uma deformação pura. Este será denominado o tensor deformação.

2.4.4 Tensor de elasticidade

O tensor de elasticidade, Λ_{ijkl} , é um tensor de ordem quatro e contém $3^4 = 81$ elementos. Fazendo uso das propriedades de simetria do tensor de tensão para o caso de não existirem torques internos, então Λ_{ijkl} também é simétrico, conforme demonstrado a seguir:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad \Rightarrow \quad \Lambda_{jikl} = \Lambda_{ijkl} \tag{2.26}$$

Então:

$$\begin{aligned}
\sigma_{21} &= \Lambda_{21kl} \varepsilon_{kl} & \sigma_{12} &= \Lambda_{12kl} \varepsilon_{kl} \\
\sigma_{21} = \sigma_{12} & \Rightarrow & \Lambda_{21kl} \varepsilon_{kl} &= \Lambda_{12kl} \varepsilon_{kl} \\
& & (\Lambda_{21kl} - \Lambda_{12kl}) \varepsilon_{kl} &= 0 \\
& & \Lambda_{21kl} &= \Lambda_{12kl} \\
& & \Lambda_{jikl} &= \Lambda_{ijkl}
\end{aligned}$$

O número das constantes de material é reduzido de 81 para 54. De modo similar podemos utilizar a simetria do tensor de deformação.

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \quad \Rightarrow \quad \Lambda_{ijkl} = \Lambda_{ijkl}$$

Isto reduz ainda mais o número de constantes do material para 36 [32].

Seguindo [29], podemos introduzir um espaço vetorial hexa-dimensional com multiplicação escalar usual. Dessa forma, as equações anteriores se escrevem como:

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6), \quad \varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6); \quad (2.27)$$

$$\sigma_1 = \sigma_{11}, \quad \sigma_2 = \sigma_{22}, \quad \sigma_3 = \sigma_{33}, \quad \sigma_4 = \sqrt{2}\sigma_{23}, \quad \sigma_5 = \sqrt{2}\sigma_{13}, \quad \sigma_6 = \sqrt{2}\sigma_{12},$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{11}, \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_{22}, \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_{33}, \quad \varepsilon_4 = \sqrt{2}\varepsilon_{23}, \quad \varepsilon_5 = \sqrt{2}\varepsilon_{13}, \quad \varepsilon_6 = \sqrt{2}\varepsilon_{12}. \quad (2.28)$$

A Lei de Hooke adquire a seguinte forma:

$$\sigma_i = \Lambda_{ij}\varepsilon_j, \quad (2.29)$$

com $i, j = 1, \dots, 6$.

O tensor de elasticidade, nesse espaço vetorial adquire a seguinte forma:

$$\Lambda_{ij} = \begin{pmatrix} \Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1133} & \sqrt{2}\Lambda_{1123} & \sqrt{2}\Lambda_{1113} & \sqrt{2}\Lambda_{1112} \\ \Lambda_{2211} & \Lambda_{2222} & \Lambda_{2233} & \sqrt{2}\Lambda_{2223} & \sqrt{2}\Lambda_{2213} & \sqrt{2}\Lambda_{2212} \\ \Lambda_{3311} & \Lambda_{3322} & \Lambda_{3333} & \sqrt{2}\Lambda_{3323} & \sqrt{2}\Lambda_{3313} & \sqrt{2}\Lambda_{3312} \\ \sqrt{2}\Lambda_{2311} & \sqrt{2}\Lambda_{2322} & \sqrt{2}\Lambda_{2333} & 2\Lambda_{2323} & 2\Lambda_{2313} & 2\Lambda_{2312} \\ \sqrt{2}\Lambda_{1311} & \sqrt{2}\Lambda_{1322} & \sqrt{2}\Lambda_{1333} & 2\Lambda_{1323} & 2\Lambda_{1313} & 2\Lambda_{1312} \\ \sqrt{2}\Lambda_{1211} & \sqrt{2}\Lambda_{1222} & \sqrt{2}\Lambda_{1233} & 2\Lambda_{1223} & 2\Lambda_{1213} & 2\Lambda_{1212} \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Sendo assim, podemos representar a Lei de Hooke, adotando a nomenclatura de Voigt, do seguinte modo:

$$\sigma_{xx} = \lambda_{11}\varepsilon_{xx} + \lambda_{12}\varepsilon_{yy} + \lambda_{13}\varepsilon_{zz} + \lambda_{14}\varepsilon_{xy} + \lambda_{15}\varepsilon_{yz} + \lambda_{16}\varepsilon_{xz} \quad (a)$$

$$\sigma_{yy} = \lambda_{21}\varepsilon_{xx} + \lambda_{22}\varepsilon_{yy} + \lambda_{23}\varepsilon_{zz} + \lambda_{24}\varepsilon_{xy} + \lambda_{25}\varepsilon_{yz} + \lambda_{26}\varepsilon_{xz} \quad (b)$$

$$\sigma_{zz} = \lambda_{31}\varepsilon_{xx} + \lambda_{32}\varepsilon_{yy} + \lambda_{33}\varepsilon_{zz} + \lambda_{34}\varepsilon_{xy} + \lambda_{35}\varepsilon_{yz} + \lambda_{36}\varepsilon_{xz} \quad (c) \quad (2.31)$$

$$\sigma_{xy} = \lambda_{41}\varepsilon_{xx} + \lambda_{42}\varepsilon_{yy} + \lambda_{43}\varepsilon_{zz} + \lambda_{44}\varepsilon_{xy} + \lambda_{45}\varepsilon_{yz} + \lambda_{46}\varepsilon_{xz} \quad (d)$$

$$\sigma_{yz} = \lambda_{51}\varepsilon_{xx} + \lambda_{52}\varepsilon_{yy} + \lambda_{53}\varepsilon_{zz} + \lambda_{54}\varepsilon_{xy} + \lambda_{55}\varepsilon_{yz} + \lambda_{56}\varepsilon_{xz} \quad (e)$$

$$\sigma_{xz} = \lambda_{61}\varepsilon_{xx} + \lambda_{62}\varepsilon_{yy} + \lambda_{63}\varepsilon_{zz} + \lambda_{64}\varepsilon_{xy} + \lambda_{65}\varepsilon_{yz} + \lambda_{66}\varepsilon_{xz} \quad (f)$$

Onde os termos λ_{ij} são constantes cujo valores depende do material. Para reduzir ainda mais o número de constantes, utiliza-se a propriedade do tensor elasticidade ser simétrico, pois os tensores deformação e tensão são simétricos reduzindo o número de constantes elásticas para apenas 21.

O material elástico linear anisotrópico mais generalizado possui, portanto, 21 constantes diferentes. Materiais caracterizados por tensores dessa forma são considerados triclinicos, por não apresentarem planos de simetria de suas propriedades materiais. Sendo a sua representação matricial, na notação de Voigt:

$$\Lambda_{ij} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \lambda_{14} & \lambda_{15} & \lambda_{16} \\ & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \lambda_{24} & \lambda_{25} & \lambda_{26} \\ & & \lambda_{33} & \lambda_{34} & \lambda_{35} & \lambda_{36} \\ & & & \lambda_{44} & \lambda_{45} & \lambda_{46} \\ & & & & \lambda_{55} & \lambda_{56} \\ & & & & & \lambda_{66} \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Quando o material permitir operações de simetrias (rotações, reflexões ou inversões) em sua estrutura, o número das constantes do material, representado pelo tensor de elasticidade, é também reduzido. Acontece que as simetrias do material impõem restrições sobre o tensor de elasticidade Λ , e isso proporciona uma maneira natural para classificar os meios elásticos [35]. Nosso objetivo neste trabalho é es-

tudar estas restrições em detalhe para materiais ortotrópicos que possuem três planos ortogonais de simetria.

Vamos considerar apenas operações de simetrias rígidas de rotação, em relação a dois referenciais (x, y, z) e (x', y', z') para explorar as simetrias na estrutura de um material anisotrópico.

Considerando um mesmo material com as mesmas constantes definidas no tensor Λ_{ij} , pode-se afirmar que a lei de Hooke Generalizada para um novo referencial x', y' e z' será a mesma que a do referencial x, y , e z . Sendo assim, a equação para representar $\sigma_{x'x'}$ será como se segue abaixo:

$$\sigma_{x'x'} = \lambda_{11}\varepsilon_{x'x'} + \lambda_{12}\varepsilon_{y'y'} + \lambda_{13}\varepsilon_{z'z'} + \lambda_{14}\varepsilon_{x'y'} + \lambda_{15}\varepsilon_{y'z'} + \lambda_{16}\varepsilon_{x'z'} \quad (2.33)$$

As outras cinco equações são similares as equações (2.31) de b a f.

Primeiro, considerando uma rotação de 180° no eixo z . O cosseno diretor entre os eixos é dado a seguir:

	x	y	z
x'	-1	0	0
y'	0	-1	0
z'	0	0	1

O tensor $\sigma_{i'j'}$ no novo referencial é relacionado com o tensor σ_{ij} no antigo referencial na seguinte maneira:

$$\sigma_{i'j'} = a_{i'i}a_{j'j}\sigma_{ij} \quad (2.34)$$

Como consequência, aplicando os cossenos diretores na equação acima, chega-se ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'} &= \sigma_{xx} & \sigma_{x'y'} &= \sigma_{xy} & (a) \\ \sigma_{y'y'} &= \sigma_{yy} & \sigma_{y'z'} &= -\sigma_{xz} & (b) \\ \sigma_{z'z'} &= \sigma_{zz} & \sigma_{x'z'} &= -\sigma_{xz} & (c) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Usando a mesma analogia, agora para o tensor de deformação, com a relação tensorial dada por:

$$\varepsilon_{i'j'} = a_{i'i}a_{j'j}\varepsilon_{ij} \quad (2.36)$$

Sendo o mesmo cosseno diretor, pois é a mesma rotação, tem-se como resultado:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{x'x'} &= \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{x'y'} &= \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{y'y'} &= \varepsilon_{yy} & (a) & (2.37) \\ \varepsilon_{y'z'} &= -\varepsilon_{yz} & \varepsilon_{z'z'} &= \varepsilon_{zz} & \varepsilon_{x'z'} &= -\varepsilon_{xz} & (b) \end{aligned}$$

Substituindo as equações (2.37) na primeira equação (2.33):

$$\sigma_{xx} = \lambda_{11}\varepsilon_{xx} + \lambda_{12}\varepsilon_{yy} + \lambda_{13}\varepsilon_{zz} + \lambda_{14}\varepsilon_{xy} - \lambda_{15}\varepsilon_{yz} + \lambda_{16}\varepsilon_{xz} \quad (2.38)$$

Comparando com a equação (2.31) a):

$$\lambda_{15} = \lambda_{16} = 0 \quad (2.39)$$

Analogamente, examinando as equações (2.31) de b à f, tem-se:

$$\begin{aligned} \lambda_{25} &= 0 & \lambda_{36} &= 0 & \lambda_{51} &= 0 \\ \lambda_{54} &= 0 & \lambda_{63} &= 0 & \lambda_{26} &= 0 \\ \lambda_{45} &= 0 & \lambda_{52} &= 0 & \lambda_{61} &= 0 \\ \lambda_{64} &= 0 & \lambda_{35} &= 0 & \lambda_{46} &= 0 \\ & & \lambda_{53} &= 0 & \lambda_{62} &= 0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

A matriz que representa o tensor Λ_{ijkl} , tem a forma:

$$\Lambda_{ij} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \lambda_{14} & 0 & 0 \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \lambda_{24} & 0 & 0 \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} & \lambda_{34} & 0 & 0 \\ \lambda_{41} & \lambda_{42} & \lambda_{43} & \lambda_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{55} & \lambda_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{65} & \lambda_{66} \end{pmatrix}$$

obtendo 13 constantes elásticas diferentes a determinar, sendo esta simetria definida como material monoclinico.

Uma segunda rotação de 180^0 em torno do eixo x e usando o mesmo desenvolvimento matemático dos parágrafos anteriores, sendo o cosseno diretor representado pela matriz: Usando as relações de transformações dos tensores tensão e deformação,

	x	y	z
x'	1	0	0
y'	0	-1	0
z'	0	0	-1

tem-se como resultado;

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'} &= \sigma_{xx} & \sigma_{x'y'} &= -\sigma_{xy} & \varepsilon_{x'x'} &= \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{x'y'} &= -\varepsilon_{xy} \\ \sigma_{y'y'} &= \sigma_{yy} & \sigma_{y'z'} &= \sigma_{yz} & \varepsilon_{y'y'} &= \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{y'z'} &= \varepsilon_{yz} \\ \sigma_{z'z'} &= \sigma_{zz} & \sigma_{x'z'} &= -\sigma_{xz} & \varepsilon_{z'z'} &= \varepsilon_{zz} & \varepsilon_{x'z'} &= -\varepsilon_{xz} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Substituindo nas equações (2.33) de a à f, tem-se como resultado:

$$\lambda_{14} = \lambda_{24} = \lambda_{34} = \lambda_{41} = \lambda_{42} = \lambda_{43} = \lambda_{56} = \lambda_{65} = 0 \quad (2.42)$$

A matriz do módulo elástico reduz à seguinte forma:

$$\Lambda_{ij} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{66} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

Esta é a matriz para o material *ortotrópico* apresentando apenas 9 coeficientes elásticos diferentes.

Capítulo 3

Tensões principais biaxial e triaxial

3.1 Introdução

Para determinar as componentes do tensor de elasticidade ortotrópico, usamos os elementos do grupo de simetria ortotrópico, associada a uma abordagem fenomenológica.

O comportamento elástico de um material ortotrópico é caracterizada por nove constantes diferentes[36]. Em uma linguagem fenomenológica, eles são caracterizado por: três módulos longitudinais de elasticidade ou módulo de Young (E_x, E_y, E_z), que descrevem a tendência de um objeto de se deformar ao longo de um eixo, quando forças opostas são aplicadas ao longo desse eixo, três módulos transversais de elasticidade ou módulo de cisalhamento (G_{xy}, G_{yz}, G_{xz}) que descrevem a tendência de um objeto de sofrer cisalhamento (deformação da forma à volume constante), quando influenciado por forças opostas, e três de coeficientes de Poisson ($\nu_{xy}, \nu_{yz}, \nu_{xz}$) que descrevem a relação entre a deformação de contração transversal sobre a deformação de extensão longitudinal no sentido do alongamento.

Note que a ligação entre a tensão e o coeficiente de Poisson ocorre em nível molecular sendo que o efeito do coeficiente de Poisson é causado pelo ligeiro movi-

mento entre as moléculas e o alongamento das ligações moleculares dentro da rede do material para acomodar a tensão. Quando o material é alongado na direção da tensão, as outras direções ortogonais apresentam redução. Esse comportamento multiplicado milhões de vezes ao longo da malha do material é o que forma o fenômeno macroscópico.

Matematicamente o coeficiente de Poisson é representado por um tensor, a saber:

$$\nu_{ij} = -\frac{\varepsilon_{jj}}{\varepsilon_{ii}}, \quad (3.1)$$

onde j representa a deformação transversal e i a deformação longitudinal.

Multiplicando ambos os lados da equação (2.2) por Λ_{klj}^{-1} . Vamos encontrar o inverso da Lei de Hooke, a saber:

$$\varepsilon_{kl} = \Lambda_{klj}^{-1} \sigma_{ij}, \quad (3.2)$$

Onde Λ_{klj}^{-1} é o tensor de rigidez (compliance) representado com a mesma estrutura do tensor de elasticidade:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Para calcular as constantes c_{ij} , usamos os dados provenientes da abordagem fenomenológica, obtida empiricamente. Para obter esses dados experimentais, aplicamos uma tensão uniaxial (definida como um estado de esforço para o qual apenas uma componente principal não seja zero) na amostra. Assim, podemos fazer um teste com a tensão de cisalhamento, que permite obter as relações entre o módulo de Young e

do coeficiente de Poisson, por exemplo, na direção x . Do mesmo modo, fazemos um procedimento nas direções y e z , seguindo o mesmo raciocínio para determinar os outros coeficientes de Poisson, ν_{yx} , ν_{zy} e ν_{xz} .

Usando o tensor de rigidez, o comportamento elástico de um material ortotrópico é representado como segue:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{zx}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{xz}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{xy}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Observe que a matriz que caracteriza o material é simétrica, sendo assim temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \frac{\nu_{yx}}{E_y} &= \frac{\nu_{xy}}{E_x} \\ \frac{\nu_{zx}}{E_z} &= \frac{\nu_{xz}}{E_x} \\ \frac{\nu_{yz}}{E_y} &= \frac{\nu_{zy}}{E_z} \end{aligned} \quad (3.5)$$

nos casos em que os módulos de cisalhamento não estão disponíveis, podem ser calculados pelas seguintes equações[3]:

$$G_{xy} = \frac{E_x E_y}{E_x + E_y + 2\nu_{xy} E_x} \quad (3.6)$$

$$G_{yz} = \frac{E_y E_z}{E_y + E_z + 2\nu_{yz} E_y} \quad (3.7)$$

$$G_{xz} = \frac{E_x E_z}{E_x + E_z + 2\nu_{xz} E_x}. \quad (3.8)$$

Considerando agora o tensor de elasticidade ortotrópico, dado pela equação (3.4), vamos encontrar a relação inversa (3.4) seguindo Lempriere [15]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(-1 + \nu_{yz} \nu_{zy}) E_x}{\Delta} & -\frac{(\nu_{yx} + \nu_{yz} \nu_{zx}) E_x}{\Delta} & -\frac{(\nu_{yx} \nu_{zy} + \nu_{zx}) E_x}{\Delta} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{(\nu_{xz} \nu_{zy} + \nu_{xy}) E_y}{\Delta} & \frac{(-1 + \nu_{xz} \nu_{zx}) E_y}{\Delta} & -\frac{(\nu_{zy} + \nu_{xy} \nu_{zx}) E_y}{\Delta} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{(\nu_{xz} + \nu_{yz} \nu_{xy}) E_z}{\Delta} & -\frac{(\nu_{yz} + \nu_{xz} \nu_{yx}) E_z}{\Delta} & \frac{(-1 + \nu_{xy} \nu_{yx}) E_z}{\Delta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2G_{yz} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2G_{xz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2G_{xy} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

onde $\Delta := \nu_{xz} \nu_{yx} \nu_{zy} + \nu_{xz} \nu_{zx} + \nu_{xy} \nu_{yx} + \nu_{yz} \nu_{xy} \nu_{zx} - 1 + \nu_{yz} \nu_{zy}$. Esta é a representação da matriz da lei de Hooke generalizada na notação de Voigt, para simetria ortotrópica.

3.2 Deformação, Tensão e Sistema de Coordenada

Segundo Lima[37], para desenvolver as equações básicas que relacionam deformação e tensão é necessário escrever as tensões em função de um sistema de coordenadas. O sistema escolhido, geralmente, é de coordenadas ortonormais, ou seja, direção da deformação (eixo P_1), direção transversal (eixo P_2) e direção normal (eixo P_3).

Quando a medida é realizada, utiliza-se um sistema de eixos que é o do laboratório, isto é, os eixos L_1 , L_2 e L_3 , mostrado na figura (3.1):

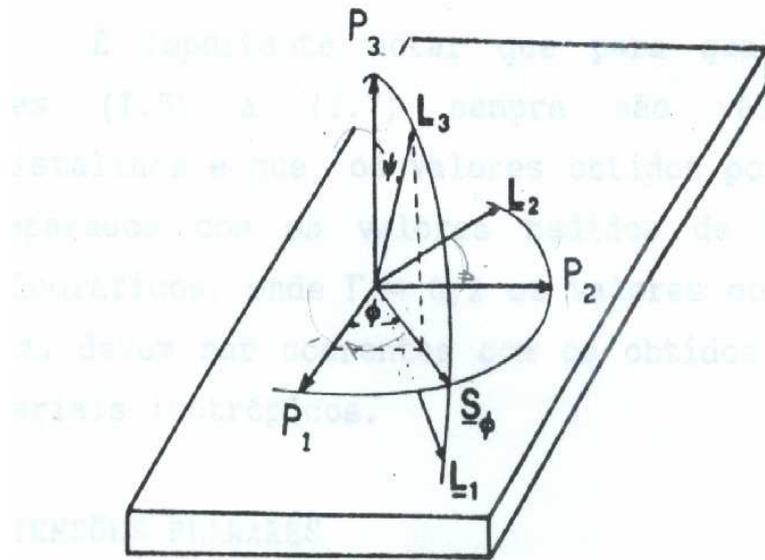


Figure 3.1: Sistema de coordenadas do laboratório (L_i) e o sistema de coordenadas da amostra (P_i).

A relação do tensor de deformação entre os dois sistemas de coordenadas na representação das matrizes é dada por:

$$\varepsilon'_{ij} = w_{ik} \varepsilon_{kl} w_{jl}^T \quad (3.10)$$

onde ε_{ij} é o tensor de deformação no sistema de eixo principal P_i , ε'_{ij} é o tensor de deformação no sistema de eixo do laboratório L_i e w é a matriz de transformação de coordenadas P_i em L_i obtida a partir de:

$$w_{ik} = a_{ij} a_{jk}, \quad (3.11)$$

com

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & -\sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \psi & 0 & \cos \psi \end{pmatrix},$$

e

$$a_{jk} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Tendo como resultado:

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \psi & \sin \phi \cos \psi & -\sin \psi \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \cos \phi \sin \psi & \sin \phi \sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix}$$

onde consideramos as rotações de corpos rígidos nos planos xz e xy respectivamente, relativas aos ângulos de Euler ψ e ϕ . Os ângulos de Euler constituem um conjunto de três coordenadas angulares que servem para especificar a orientação de um sistema de referência de eixos ortogonais, normalmente móvel, com respeito a outro sistema de referência de eixos ortogonais normalmente fixos[38].

Vamos padronizar uma direção como sendo a direção da medida experimental (direção L_3). Sendo assim, chegamos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{z'z'} = & \cos^2 \phi \sin^2 \psi \varepsilon_{xx} + \sin 2\phi \sin^2 \psi \varepsilon_{xy} + \cos \phi \sin 2\psi \varepsilon_{xz} \\ & + \sin^2 \phi \sin^2 \psi \varepsilon_{yy} + \sin 2\psi \sin \phi \varepsilon_{yz} + \cos^2 \psi \varepsilon_{zz} . \end{aligned} \quad (3.12)$$

De acordo com o pressuposto da variação do volume para pequenas deformações, usando o fato de que a deformação responsável pela variação do volume, isto é, ε_{ij} ser pequena para $i \neq j$ teremos uma redução na equação (3.12) para:

$$\varepsilon_{z'z'} = \varepsilon_{xx} \cos^2 \phi \sin^2 \psi + \varepsilon_{yy} \sin^2 \phi \sin^2 \psi + \varepsilon_{zz} \cos^2 \psi . \quad (3.13)$$

Os tensores deformação e tensão estarão sempre relacionados ao eixo principal. Sendo assim, vamos estudar os estados de tensão principal triaxial, que é definida

quando existem tensões nas direções x, y e z, mais ainda, iremos estudar a tensão principal biaxial, que é definida quando existem tensões nas direções x e y.

3.3 Estado de Tensão Principal Triaxial

Para calcular a equação do estado de tensão principal triaxial, vamos usar a equação (3.4), tomando as direções principais, a saber:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E_x}\sigma_{xx} - \frac{\nu_{yx}}{E_y}\sigma_{yy} - \frac{\nu_{zx}}{E_z}\sigma_{zz} \\ \varepsilon_{yy} &= -\frac{\nu_{xy}}{E_x}\sigma_{xx} + \frac{1}{E_y}\sigma_{yy} - \frac{\nu_{zy}}{E_z}\sigma_{zz} \\ \varepsilon_{zz} &= -\frac{\nu_{xz}}{E_x}\sigma_{xx} - \frac{\nu_{yz}}{E_y}\sigma_{yy} + \frac{1}{E_z}\sigma_{zz}.\end{aligned}\quad (3.14)$$

Substituindo as equações (3.14) na equação (3.13), temos como resultado:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{z'z'} &= \cos^2 \phi \sin^2 \psi \left[\frac{\sigma_{xx}}{E_x} - \frac{\nu_{yx}}{E_y}\sigma_{yy} - \frac{\nu_{zx}}{E_z}\sigma_{zz} \right] + \sin^2 \phi \sin^2 \psi \left[-\frac{\nu_{xy}}{E_x}\sigma_{xx} + \frac{1}{E_y}\sigma_{yy} - \frac{\nu_{zy}}{E_z}\sigma_{zz} \right] + \\ &+ \cos^2 \psi \left[-\frac{\nu_{xz}}{E_x}\sigma_{xx} - \frac{\nu_{yz}}{E_y}\sigma_{yy} + \frac{1}{E_z}\sigma_{zz} \right].\end{aligned}\quad (3.15)$$

Após manipulações apropriadas, obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{z'z'} &= \sin^2 \psi \left\{ \frac{\sigma_{xx}}{E_x} [(1 + \nu_{xy}) \cos^2 \phi + (\nu_{xz} - \nu_{xy})] + \frac{\sigma_{yy}}{E_y} [(1 + \nu_{yx}) \sin^2 \phi + (\nu_{yz} - \nu_{yx})] - \right. \\ &\left. - \frac{\sigma_{zz}}{E_z} (1 + \nu_{zy} \sin^2 \phi + \nu_{zx} \cos^2 \phi) \right\} - \left(\frac{\nu_{xz}}{E_x}\sigma_{xx} + \frac{\nu_{yz}}{E_y}\sigma_{yy} - \frac{\sigma_{zz}}{E_z} \right),\end{aligned}\quad (3.16)$$

onde ν_{xy} , ν_{xz} , ν_{yx} , ν_{yz} , ν_{zy} and ν_{zx} são os coeficientes de Poisson e E_x , E_y e E_z são as constantes elásticas nas direções dos eixos x, y e z.

A equação (3.16) é a equação do nosso modelo proposto para o estado de tensão principal triaxial.

3.4 Estado de Tensão Principal Biaxial

Considerando que $\sigma_{zz} = 0$, nas equações (3.14), teremos para tensão superficial:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{\sigma_{xx}}{E_x} - \frac{\nu_{yx}}{E_y} \sigma_{yy} \\ \varepsilon_{yy} &= -\frac{\nu_{xy}}{E_x} \sigma_{xx} + \frac{\sigma_{yy}}{E_y} \\ \varepsilon_{zz} &= -\frac{\nu_{xz}}{E_x} \sigma_{xx} - \frac{\nu_{yz}}{E_y} \sigma_{yy}.\end{aligned}\quad (3.17)$$

Substituindo a equação (3.18) na equação (3.13), obtemos:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{z'z'} &= \cos^2 \phi \sin^2 \psi \left[\frac{\sigma_{xx}}{E_x} - \frac{\nu_{yx}}{E_y} \sigma_{yy} \right] + \sin^2 \phi \sin^2 \psi \left[-\frac{\nu_{xy}}{E_x} \sigma_{xx} + \frac{\sigma_{yy}}{E_y} \right] + \\ &\quad + \cos^2 \psi \left[-\frac{\nu_{xz}}{E_x} \sigma_{xx} - \frac{\nu_{yz}}{E_y} \sigma_{yy} \right].\end{aligned}\quad (3.18)$$

Após a manipulação matemática, chegamos ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{z'z'} &= \sin^2 \psi \left\{ \frac{\sigma_{xx}}{E_x} [(1 + \nu_{xy}) \cos^2 \phi + (\nu_{xz} - \nu_{xy})] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sigma_{yy}}{E_y} [(1 + \nu_{yx}) \sin^2 \phi + (\nu_{yz} - \nu_{yx})] \right\} - \left(\frac{\nu_{xz}}{E_x} \sigma_{xx} + \frac{\nu_{yz}}{E_y} \sigma_{yy} \right).\end{aligned}\quad (3.19)$$

onde $\nu_{xy}, \nu_{xz}, \nu_{yx}$ e ν_{yz} são os coeficientes de Poisson e E_x e E_y são as constantes elásticas nas direções dos eixos x e y . Esta equação relaciona as deformações com as tensões superficiais para materiais ortotrópicos.

A equação (3.19) é a equação do nosso modelo proposto para o estado de tensão principal biaxial.

Capítulo 4

Análise de Coerência da Equação Ortotrópica

4.1 Introdução

As equações (3.16) e (3.19) descrevem o comportamento de materiais ortotrópica com relação aos eixos principais da amostra. Sob condições de isotropia elas representam materiais isotrópicos em concordância com o modelo já existente na literatura. Neste sentido, para mostrar sua coerência vamos determinar os estados de tensão triaxial e biaxial de um material isotrópico usando as equações do nosso modelo.

Além disso, vamos demonstrar a consistência do nosso modelo usando os resultados experimentais do trabalho de Faurie *e colaboradores* [19]. O trabalho de D. faurie e colaboradores relacionaram as medidas de difração de raios-x de luz síncrotron, utilizado para estudar as deformações elásticas, em filmes finos de ouro, depositado sobre um substrato, com carga uniaxial. Mostrou, utilizando o método do grupo cristalito, que é possível calcular algumas constantes elásticas do material. O CGM foi introduzido por Willemse e colaboradores e possui como principal hipótese que, na direção correspondente à intensidade dos pólos, apenas o grupo considerado contribui para as respectivas linhas de difração, e, por conseguinte, um determinado

valor da deformação, todas as influências dos outros cristalitos refletindo nesta direção são negligenciados.

Quando considerou o caso de uma carga uniaxial aplicada sobre um sistema filme-substrato, uma tensão transversal é induzido pela diferença entre a razão de Poisson do filme fino e do substrato. Uma abordagem mecânica foi utilizada para descrever o filme fino-substrato, a fim de determinar a tensão gerada no filme. Em seguida, usando o CGM, a constante elástica de um filme fino com textura foi avaliada após a determinação da deformação nas direções dos pólos de várias famílias de planos. Sendo assim, a nossa proposta é diferente do trabalho de D Faurie, pois calcula as constantes elásticas em várias direções do filme.

4.2 Estado de Tensão Principal Triaxial

Em materiais isotrópicos, a exigência é que os coeficientes de Poisson e as constantes elásticas sejam iguais para qualquer direção, uma vez que as deformações transversais em qualquer direção e sentidos axiais são também iguais, isto é:

$$\nu_{xy} = \nu_{xz} = \nu_{yx} = \nu_{yz} = \nu_{zy} = \nu_{zx} = \nu$$

$$E_x = E_y = E_z = E$$

Substituindo na equação (3.16) e após algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\varepsilon_{z'z'} = \left(\frac{1 + \nu}{E}\right) \sin^2 \psi (\sigma_{xx} \cos^2 \phi + \sigma_{yy} \sin^2 \phi - \sigma_{zz}) - \frac{\nu}{E} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) + \left(\frac{1 + \nu}{E}\right) \sigma_{zz} \quad (4.1)$$

que está de acordo com o resultado de materiais isotrópicos[40].

4.3 Estado de Tensão Principal Biaxial

De modo análogo ao realizado no item 4.2, teremos:

$$\nu_{xy} = \nu_{xz} = \nu_{yx} = \nu_{yz} = \nu$$

$$E_x = E_y = E$$

Substituindo na equação (3.19) e após algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\varepsilon_{z'z'} = \left(\frac{1 + \nu}{E} \right) \sin^2 \psi \left(\sigma_{xx} \cos^2 \phi + \sigma_{yy} \sin^2 \phi \right) - \frac{\nu}{E} \left(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} \right), \quad (4.2)$$

que está em concordância com o resultado para materiais isotrópicos[10].

4.4 Coerência experimental para o estado principal biaxial de tensão

É necessário medir as constantes elásticas, a fim de verificar as previsões do nosso modelo. A maneira mais simples para medir as constantes é a aplicação de uma tensão uniaxial em uma amostra do material e em seguida medir a evolução da $\varepsilon(z'z')$ para diferentes valores de tensão aplicada. Geralmente, aplicamos uma tensão de elongação ou de compressão no material [12].

Para isso, consideramos o trabalho de Faurie *et al* que estabeleceu as constantes elásticas de uma fina película de ouro texturizado com simetria transversalmente isotrópica, combinando difração de raios X de luz síncrotron e carga "in situ" no ensaio de tração e utilizando o método de grupo do cristalito (CGM). A análise da deformação pelo método CGM permitiu a previsão não linear da relação entre a deformação e $\sin^2 \psi$ obtidos para os filmes finos. O método do mínimo quadrado foi usado para ajustar os dados experimentais e permitir determinar as constantes elásticas. Neste trabalho foi considerado apenas as tensões σ_{xx} e σ_{yy} , sendo o caso de um estado de tensão principal biaxial [19].

Observa-se que um material transversalmente isotrópico tem 5 constantes [41] que caracterizam seu tensor elástico. Lembrando da equação (3.4) e assumindo que o plano de simetria é xy , temos as seguintes constantes características: $E_x, E_z, G_{xy}, \nu_{xy}, \nu_{xz}$. Neste ponto, ressaltamos que a utilização da tensão biaxial não permite a determinação do módulo de Young E_z .

Assim, para testar a coerência experimental do nosso modelo, usamos os dados experimentais descritos na ref. [19]. Para este fim, usamos como entrada os valores de σ_{xx} e σ_{yy} obtidos por Faurie *et al* [19] e descritos na tabela II desse trabalho.

É importante notar que, no caso de um material com textura, ou material anisotrópico, é necessário obter a figura de polo de raios X [19] para cada família de planos, a fim de determinar os ângulos ψ que podem ser usados na equação do modelo.

Estudando os gráficos experimentais deste artigo, pudemos correlacionar os dados com a nossa proposta, a fim de observar uma consistência experimental.

Para este fim, consideramos a partir do trabalho de Faurie *et al* [19], quatro gráficos experimentais representados pelas figuras (7), (8), (10) e (11) do citado artigo. Assim, pudemos comparar a equação extraída de cada reta com uma equação teórica, decorrentes do nosso modelo, para depois obtermos as constantes elásticas e comparar com os resultados da Faurie *et al* [19]. No nosso caso, usamos apenas dois gráficos para esta determinação, como veremos a seguir.

Vamos detalhar o trabalho observando o gráfico da figura (7) de Faurie *et al* [19], representado na figura 4.1, que mostra a evolução da deformação, ε , como uma função da carga F aplicada ao composto filme / substrato para cada família de planos. Neste gráfico, para cada ângulo constante ψ e $\phi = 0$, obtido previamente com as figuras de pólo, foi aplicada uma carga que gerou uma tensão σ_{xx} and σ_{yy} no filme fino.

É importante comentar que o método de difração de raios X para o cálculo de tensões em materiais policristalinos se baseia na consideração de que as deformações são as variações das distâncias interplanares de famílias de planos cristalinos e que na direção da medida temos $\varepsilon_{z',z'} = \varepsilon_{\phi,\psi}$.

Vamos usar a equação de estado de tensão biaxial principal (3.19) do nosso modelo nos dados experimentais oriundos do gráfico (7) de Faurie *e colaboradores*, a saber:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,\psi} = & \left[\sin^2 \psi + (\sin^2 \psi - 1) \nu_{xz} \right] \frac{\sigma_{xx}}{E_x} + [(\sin^2 \psi - 1) \nu_{yz} \\ & - \nu_{yx} \sin^2 \psi] \frac{\sigma_{yy}}{E_y}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

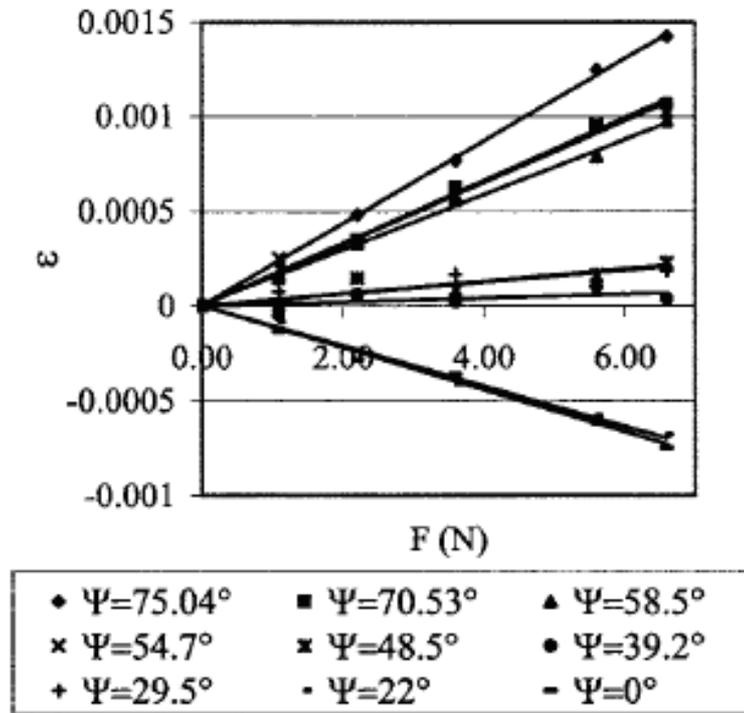


Figure 4.1: Evolução da deformação, $\varepsilon_{0,\psi}$, em função da carga aplicada no compósito filme/substrato para cada família de planos[19].

Considerando uma anisotropia transversalmente isotrópica do filme fino, temos as condições [15]:

$$\begin{aligned} \nu_{xz} &= \nu_{yz}; E_x = E_y = E, \\ \nu_{xy} &= \nu_{yx}; E_z = \text{indeterminado}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

utilizamos o estado de tensão biaxial.

Substituindo as condições (4.4) na equação (4.3), temos:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,\psi} &= [\sin^2 \psi + (\sin^2 \psi - 1) \nu_{xz}] \frac{\sigma_{xx}}{E} + [(\sin^2 \psi - 1) \nu_{xz} \\ &\quad - \nu_{xy} \sin^2 \psi] \frac{\sigma_{yy}}{E}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

que é a equação do nosso modelo considerando os dados no gráfico da Figura (7) do trabalho de Faurie e colaboradores.

Considerando agora o gráfico da Figura (8) da ref.[19], representado na figura 4.2, para o valor de $\phi = 0$, a equação (3.19) do nosso modelo é escrito como:

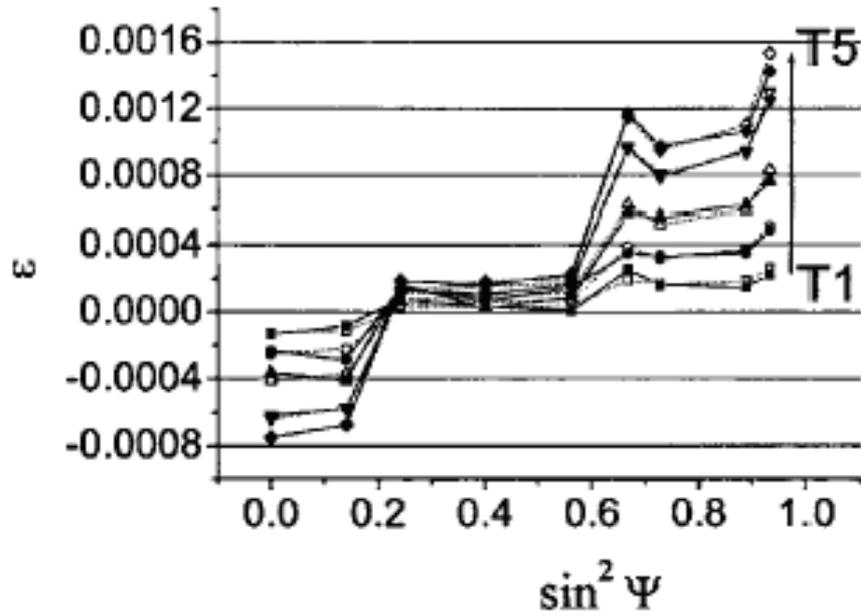


Figure 4.2: Dados experimentais para a direção de medida longitudinal ($\varepsilon_{0,\psi}$) para os estados de carga $T_1 - T_5$ [19].

$$\varepsilon_{0,\psi} = \sin^2 \psi \left[\frac{\sigma_{xx}}{E_x} (1 + \nu_{xz}) + \frac{\sigma_{yy}}{E_y} (\nu_{yz} - \nu_{yx}) \right] - \left(\sigma_{xx} \frac{\nu_{xz}}{E_x} + \sigma_{yy} \frac{\nu_{yz}}{E_y} \right). \quad (4.6)$$

Usando a condição de anisotropia transversalmente isotrópicos, eq. (4.4), temos que:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,\psi} = & \sin^2 \psi \left[\frac{\sigma_{xx}}{E} (1 + \nu_{xz}) + \frac{\sigma_{yy}}{E} (\nu_{xz} - \nu_{xy}) \right] \\ & - \left(\frac{\nu_{xz}}{E} \sigma_{xx} + \frac{\nu_{xz}}{E} \sigma_{yy} \right), \end{aligned} \quad (4.7)$$

que é a equação do nosso modelo considerando os dados no gráfico da Figura (8) do trabalho de Faurie *e colaboradores*.

Considere, agora o gráfico da figura (10) e a tabela II do trabalho de Faurie *e colaboradores* representado na figura (4.3).

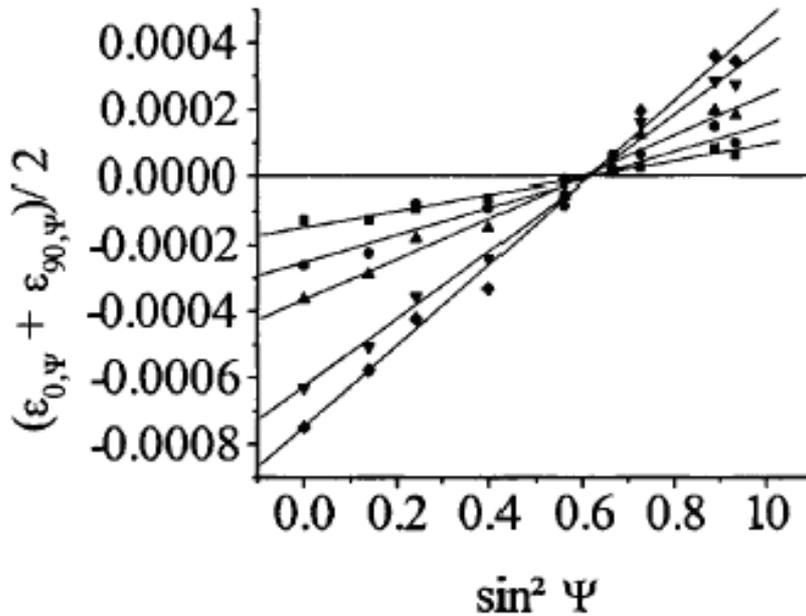


Figure 4.3: Curva experimental, $(\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2}) \times \sin^2 \psi$ para carga aplicada [19].

Este gráfico representa as cargas aplicadas na amostra, apresentado duas tensões nas direções σ_{xx} e σ_{yy} no filme fino para os valores de $\phi = 0$ e $\phi = 90$, seguindo a proposta de Faurie *e colaboradores*. A equação proposta baseado no nosso modelo é escrito como:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2} = & \sin^2 \psi \left[\frac{\sigma_{xx}}{2E_x} (1 + 2\nu_{xz} - \nu_{xy}) + \frac{\sigma_{yy}}{2E_y} (1 + 2\nu_{yz} - \nu_{yx}) \right] \\ & - \left(\sigma_{xx} \frac{\nu_{xz}}{E_x} + \sigma_{yy} \frac{\nu_{yz}}{E_y} \right). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Para anisotropia transversalmente isotrópica, eq. (4.4), os valores de ν_{xz} e ν_{yz} são iguais, pois o plano xy é isotrópico obtendo a mesma deformação, sendo assim, a equação é escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2} = & \sin^2 \psi \left[\frac{(1 + 2\nu_{xz} - \nu_{xy})}{2E} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right] \\ & - \left(\sigma_{xx} \frac{\nu_{xz}}{E} + \sigma_{yy} \frac{\nu_{xz}}{E} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Esta é a equação do modelo considerando os dados no gráfico da Figura (10) do Faurie e colaboradores, veja figura 4.4.

Para estudar o gráfico da figura (11) (vamos definir como P a magnitude da inclinação do gráfico $\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2}$ retirado do gráfico 4.3 em função de $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$). Para estes dados experimentais, obtemos a seguinte equação:

$$P = \left[\frac{(1 + 2\nu_{xz} - \nu_{xy})}{2E} \right] (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}). \quad (4.10)$$

Esta é a nossa proposta, baseado no nosso modelo, para o gráfico da figura 4.4.

Para determinar as constantes elásticas podemos usar em [19], por exemplo, uma curva do gráfico da figura (8) e uma curva do gráfico da figura (10).

Vamos começar com uma curva da figura (8) de Faurie *et al.* Usando agora a curva para a tensão T_5 , retirando os pontos, fazendo um gráfico de regressão linear (ver figura (4.5)) obtemos a seguinte equação experimental:

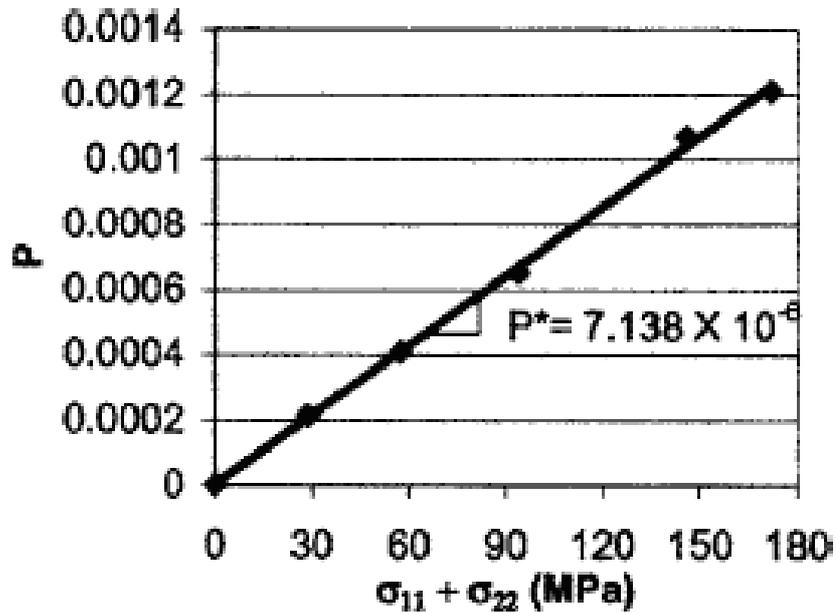


Figure 4.4: Inclinação P das retas dos gráficos $(\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2})X \sin^2 \psi$ em função de $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$.

$$\varepsilon_{0,\psi} = 2.27 \times 10^{-3} \sin^2 \psi - 7.22 \times 10^{-4}. \quad (4.11)$$

onde o coeficiente de correlação obtido foi de $R = 0.954$.

Comparando a equação acima com a equação teórica proposta pelo nosso modelo (4.7) e fazendo as manipulações apropriadas, chegamos à seguinte relação:

$$3.648 - \nu_{xy} = 9.967 \nu_{xz}. \quad (4.12)$$

Agora, usando o gráfico da carga $T5$ na figura (10) em [19] e aplicando o método dos mínimos quadrados, obtemos a equação experimental abaixo:

$$\frac{\varepsilon_{0,\psi} + \varepsilon_{90,\psi}}{2} = 1.29 \times 10^{-3} \sin^2 \psi - 7.49 \times 10^{-4}. \quad (4.13)$$

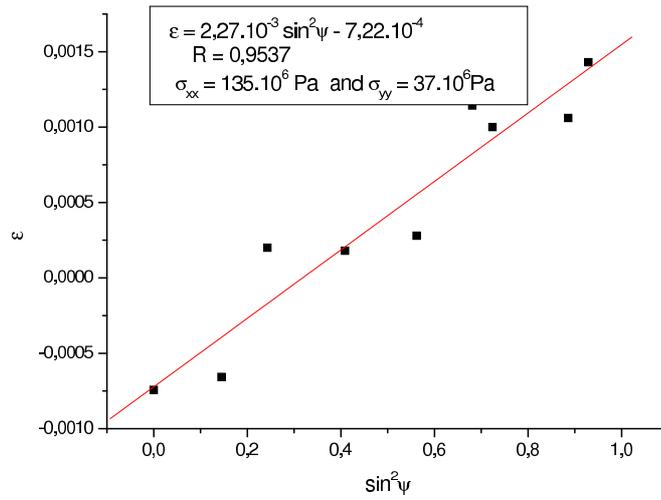


Figure 4.5: Gráfico de deformação versus $\sin^2\psi$ com fator de correlação R.

Comparando a equação 4.9 com a equação (4.13) obtemos a seguinte relação:

$$1 - \nu_{xy} = 1.446\nu_{xz} . \quad (4.14)$$

Então, resolvendo o sistema de equações (4.12) e (4.14) obtemos os seguintes resultados:

$$\nu_{xz} = 0.311 , \quad (4.15)$$

$$\nu_{xy} = 0.551 , \quad (4.16)$$

$$E = 74.1 \times 10^9 Pa . \quad (4.17)$$

Usando a equação 3.6, podemos chegar a seguinte relação:

$$G_{xy} = \frac{E_{xy}}{2(1 + \nu_{xy})} . \quad (4.18)$$

Sendo assim, podemos resumir os resultados na tabela 4.1:

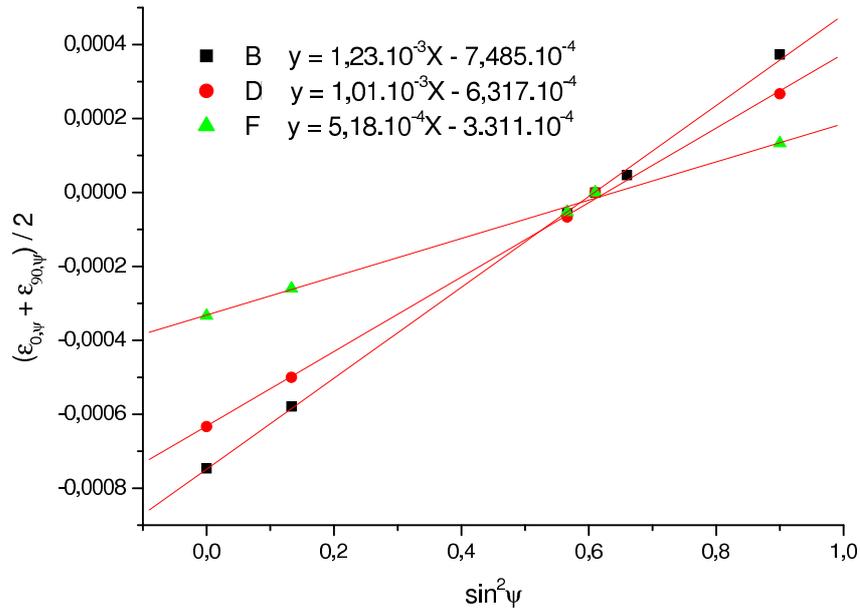


Figure 4.6: Gráfico de $(\frac{\epsilon_{0,\psi} + \epsilon_{90,\psi}}{2})X \sin^2 \psi$.

Nós comparamos na tabela (4.1) os valores obtidos do nosso modelo com os obtidos por Faurie *et al* (escrito na Tabela III do trabalho de Faurie *et al* ([19]):

Pudemos observar que os resultados das constantes elásticas, usando o nosso modelo são consistentes com relação à magnitude dos coeficientes obtidos por Faurie *et al*.

Modelo	M. Young, (GPa)		Razão Poisson, ν		M. Cis., (GPa)
Faurie <i>et al</i>	$E = 75.7$	E_z ind.	$\nu = 0.517$	-	$G = 24,9$
Nosso	$E = 74.1$	E_z ind.	$\nu_{xy} = 0.551$	$\nu_{xz} = 0.311$	$G_{xy} = 23,9$

Table 4.1: Comparação dos resultados do trabalho de Faurie *et al* ([19]) com os resultados do nosso modelo.

Portanto, devemos destacar neste ponto que nosso sistema de equações fornece o valor de $\nu_{xz} = 0.311$, o que é um resultado inédito e acabou por ser objeto de publicação do nosso trabalho na JJAP[43], conforme anexo I.

Os resultados obtidos usando o nosso modelo para as constantes elásticas, estão de acordo com as relações (4), (7) e (10) do trabalho de Lempiere [15]:

$$E_x, E_y > 0, \quad (4.19)$$

$$(1 - \nu_{xy}\nu_{yx}) > 0, \quad (4.20)$$

$$|\nu_{xy}| < \left(\frac{E_y}{E_x}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.21)$$

$$|\nu_{yx}| < \left(\frac{E_x}{E_y}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.22)$$

$$-1 < \nu_{xy} < 1. \quad (4.23)$$

Com este resultado, podemos provar a coerência do nosso modelo considerando o estado de tensão biaxial.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas futuras

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo inédito para estudar materiais que têm simetria ortotrópica nas suas propriedades mecânicas.

O modelo proposto revelou-se uma generalização do modelo para material isotrópico. Ele pode ser usado para o cálculo das tensões principais biaxial e triaxial bem como as constantes elásticas em materiais policristalino com textura ou anisotrópico utilizando a técnica de $\sin^2 \psi$ para raios X e difrações de nêutrons. É essencial, primeiro, fazer um estudo da textura do material através das figuras de pólo, a fim de obter os ângulos ψ que permitem a utilização da equação. Tendo sido feitas as medições das deformações dos possíveis ângulos ψ para vários planos cristalográficos, pode-se obter as deformações, $(\varepsilon_{\phi,\psi}^{L3})$ através do nosso modelo. Portanto, este procedimento é diferente da metodologia proposta na literatura para materiais isotrópicos que apresentam somente $(\varepsilon_{\phi,\psi}^{hkl})$.

No estudo das tensões residuais em um material policristalino por difração de raios X é necessário, primeiro, saber as constantes elásticas do material usando o nosso modelo, portanto, fazendo as medições das tensões aplicadas "in situ" em σ_{xx} e σ_{yy} , para os ângulos $\phi = 0$, $\phi = 90$ e $\psi = 0$. O nosso modelo fornece os valores de ν_{xy} e ν_{xz} não descritos no modelo isotrópico.

Como perspectivas futuras, continuaremos os estudos da coerência experimental para tensão triaxial.

Faremos estudos teóricos das propriedades dos cristalitos relacionando com as equações obtidas.

Aplicaremos o modelo proposto na engenharia de materiais, pois possibilita obter as constantes elásticas da amostra, e na ciências de materiais, relacionando as constantes elásticas com as propriedades físicas dos materiais, como por exemplo, supercondutividade.

Referências

- [1] T. Mura: *Micromechanics of Defects in Solids* (Martinus Nijhoff Publishers, New York, 1982).
- [2] A. Mani, P. Aubert, F. Mercier, H. Khodja, C. Berthier, P. Houdy: *Surface & Coatings Technology*, **194**, (2005), 190.
- [3] C. Minas and L. Salacoo: *IEEE Transanction on Magnetics*, **27**, (1991), 2381.
- [4] X. Zhang, A. Misra, H. Wang, A. L. Lima, M. F. Hundelely and R. G. Hoagland: *Journal of Applied Physics* **97**, (2005), 94302.
- [5] P. S. Prevéy and J. T. Cammett: *International Journal of Fatigue* **26**, (2004), 975-982.
- [6] A. S. Rocha, R. M. Nunes e E. M. Ferlauto: *Estudos Tecnológicos*, **4**, 3 (2008), 157-169 .
- [7] P. J. Withers and H. K. D. H. Bhadeshia: *Materials Science and Tecnology*, **17** (2001) 355-365.
- [8] E. C. Oliver, T. Mori, M. R. Daymond and P.J. Withers: *Scripta Materialia*, **53**, (2005), 609.
- [9] D. S. Kupperman, S. Majumdar, J. P. Singh, and A. Saigal: ed. M. T. Hutchings and A. D. Krawitz, (1992) 439-450.
- [10] P. S. Prevéy: *American Society for Metals*, (1986), 380-392.
- [11] Y. D. Wang, R. Lin Peng, X. L. Wang and R. L. McGreevy: *Acta Materialia*, **50**(2002),7,1717-1734.
- [12] M. E. Fitzpatrick and A. Lodini (ed.): *Analysis of Residual Stress by Diffraction using Neutron and Synchrotron Radiation* (Taylor & Francis, London, 2003).

- [13] H. R. Wenk and P. V. Houtte: Rep. Prog. Phys, **67**, (2004), 1367-1428.
- [14] J. Lu and D. Rehr: Journal of Strain Analysis, **33**, (1998), N2.
- [15] B. M. Lempriere: AIAA Journal, **6** (11), (1968), 2226-2227.
- [16] B. R. Lake, F. J. Appl and C. W. Bert: Exp. Mechanics, **10**, (6), (1970), 233-239.
- [17] G.S. Schajer and L. Yang: Exp. Mechanics, **12**, (1994), 324-333.
- [18] B. M. Clemens: MRS Bulletin, July, (1992), 46-51.
- [19] D. Faurie, P. O. Renault, E. Le Bourhis, and Ph. Goudeau: Journal of Applied Physics **98**, (2005), 093511 .
- [20] N. T. Mascia: Maderas. Ciencia y Tecnología, **5**, (1), (2003), 03-19.
- [21] T. Bohlke and A. Betram: International Journal of Solids and Structures, **38**, (2001), 9437.
- [22] C. P. Gazzara: Advances in x-ray Analysis, **28**, (1985), 197-206.
- [23] Sasaki J. M. *Difração de raios-X Notas de aulas* UFCe, 2008 <http://www.fisica.ufc.br/raiosx>.
- [24] Letícia Kuplich *Estudos sobre o $CaC_2O_4 \cdot H_2O$ presente em pedras de rins* **Disertação de Mestrado**, UFES, 2004.
- [25] Jackson J. D. *Eletrodinâmica Clássica* **Guanabara Dois**, RJ, 1983. Eletrodinâmica Clássica, Guanabara II.
- [26] Borges, F.S. *Elementos de cristalografia* **F.C.Gulbenkian**, Lisboa, Segunda edição, 1994.
- [27] Connolly, J. R. *Introduction to X-Ray Powder Diffraction* **EPS400-002**, Spring 2003, 2005.
- [28] Padilha, A. F.; Siciliano, F. *Encruamento, Recristalização, Crescimento de Grão e Textura*. **ABM** Segunda Edição (1996).
- [29] B. D. Annin and N. I. Ostrosablin: Journal of Applied Mechanics and Technical Physics **49**, (2008), 998.

- [30] Branco, Carlos A. G. de Moura. *Mecânica dos Materiais Fundação Calouste Gulbenkian/Lisboa* 2a Edição, 1998.
- [31] Klug, H.P. and L. E. Alexand: *X-ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials* (John Wiley e Sons, Segunda Edição, New York, 1974).
- [32] I. H. Shames: *Mechanics of Deformable Solids* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J, 1964).
- [33] G. E. Mase: *Continuum Mechanics* (MaGraw-Hill, New York, 1970).
- [34] C. A. Felippa and E. Oñate: *Center for Aerospace Structures*, **6** (2002) 2.
- [35] L. Bos, P. Gibson, M. Kotchetov, M. Slawinski: *Stud. Geophys. Geod.*, **48** (2004), 265-287.
- [36] S. C. Cowin and M. Mehrabadi: *Q. Jl. Mech. appl. Math.* **40** (1987) 451-476.
- [37] N. B. Lima: *Influência da Textura em Medidas de Tensão Residual* (IPEN, São Paulo, 1991) [Tese de Doutorado].
- [38] Butkov E. *Física Matemática Guanabara Dois*, RJ, 1978 688-690.
- [39] N. I. Ostrosablin: *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, **27** (4), (1986), 600-607.
- [40] U. Welzer, J. Ligot et al: *Journal of Applied Crystallography*, **38**, (2005), 1-29.
- [41] A. Bóna, I. Bucataru and M. Slawinski: *Q. JI Mech. Appl. Math*, **57** (4), (2004), 583-598.
- [42] E. M. Santos: *Modelo sobre Tensão Residual em Materiais Ortotrópico e Transversalmente Isotrópico* (UFES, Espírito Santo, 2005) [Dissertação de Mestrado].
- [43] E. M. Santos et al: *Jpn. J. Appl. Phys.* **49** (2010) 056601.