

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO  
CENTRO TECNOLÓGICO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA  
MECÂNICA

ALAN JOHNNY ROMANEL AMBROZIO

MODELO PARA O CÁLCULO DE TENSÕES  
BIAXIAL E TRIAXIAL EM MATERIAIS  
ORTOTRÓPICOS: ANÁLISE DA COERÊNCIA DAS  
EQUAÇÕES PARA UM FILME FINO  
TRANSVERSALMENTE ISOTRÓPIO DE OURO

VITÓRIA  
2013

ALAN JOHNNY ROMANEL AMBROZIO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Mecânica, na área de concentração de Engenharia de Materiais.

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

VITÓRIA  
2013

ALAN JOHNNY ROMANEL AMBROZIO

**MODELO PARA O CÁLCULO DE TENSÕES BIAXIAL E  
TRIAXIAL EM MATERIAIS ORTOTRÓPICOS: ANÁLISE DA  
COERÊNCIA DAS EQUAÇÕES PARA UM FILME FINO  
TRANSVERSALMENTE ISOTRÓPIO DE OURO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Apresentada em 27 de junho de 2013

**COMISSÃO EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Marcos Tadeu D'azeredo Orlando  
Universidade Federal do Espírito Santo  
Orientador

---

Prof. Dr. José Marcos Sasaki  
Universidade Federal do Ceará

---

Prof. Dr. Cherlio Scandian  
Universidade Federal do Espírito Santo

---

Prof. Dr. Carlos Augusto Cardoso Passos  
Universidade Federal do Espírito Santo

# Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Marcos Tadeu, pela orientação, paciência, pelos ensinamentos e por ter sempre me incentivado em todos os momentos da caminhada.

À CAPES, pelos 2 anos de bolsa, ao CNPq, à FAPES e a FINEP pelo apoio financeiro aos laboratórios envolvidos nesta pesquisa.

Aos professores Dr. Carlos Friedrich Loeffler e Dr. Fernando Menandro pela ajuda no desenvolvimento do capítulo 4 deste trabalho.

Aos amigos que sempre nos querem bem: Evandro Giuseppe, Cássio “Mãozinha”, Márcio “suíço” Fernando Pansini, Fernandinho, Fábio Arthur, Everson, Anderson, Juliana, Tales, Jhone, Ricardo, aos colegas e a todos que de certa forma contribuíram para a realização deste trabalho.

Aos meus pais, Silvana e Wanderlei, minha inspiração maior, meus irmãos, Stener, Maycon e Stephany por tudo.

À Jo, por ter ficado ao meu lado nos momentos difíceis.

Agradeço especialmente a Deus, pela vida.

“A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu,  
mas pensar o que ninguém ainda pensou sobre  
aquilo que todo mundo vê.”

Arthur Schopenhauer

**Relacionadas ao conteúdo desta dissertação:**

- “Analytical model for analysis of residual stresses in orthotropic materials”, Ambrozio A. J., Orlando, M. T. D., Passos, C. A., Belich, H. Apresentação de comunicação oral, III encontro de física aplicada , Domingos Martins, Espírito Santo, Brasil (2012).

# Resumo

Neste trabalho, um modelo analítico com base na teoria da elasticidade, proposto para mensurar as tensões residuais em materiais ortotrópicos, foi descrito e aplicado para avaliar o coeficiente de Poisson em filmes finos de ouro. Os materiais metálicos geralmente possuem anisotropia e textura cristalográfica, o que gera problemas para se analisar as tensões via difração de raios X, uma vez que, as curvas de  $\varepsilon$  vs  $\sin^2 \psi$  tornam-se não lineares. Aplicando as simetrias referentes a ortotropia do material no tensor elasticidade, obtêve-se as relações tensão deformação para materiais ortotrópicos, as equações para as deformações foram encontradas em função do estado de tensões principais triaxial e biaxial para o caso onde as deformações são calculadas via XRD. Uma nova equação foi proposta para o coeficiente de Poisson fora do plano para o caso de filmes finos transversalmente isotrópicos. Um estudo de caso foi realizado aplicando-se as equações à dados experimentais obtidos na literatura para um filme fino de ouro com textura de fibra  $\{111\}$ , assim o valor do coeficiente de Poisson fora do plano pôde ser calculado de duas formas. A primeira foi realizada ajustando os dados experimentais pelo método dos mínimos quadrados. Na segunda o coeficiente de Poisson foi calculado como um valor médio de uma superfície que foi construída para o coeficiente de Poisson fora do plano como função de  $\sin^2 \psi$  e  $\varepsilon$ .

Palavras-chave: Teoria da elasticidade, tensões residuais, difração de raios X, materiais ortotrópicos.

# Abstract

In this work an analytical model based on the theory of elasticity was proposed to measure the residual stress in orthotropic materials has been described and applied to evaluate the Poisson's ratio thin films of gold. The metallic materials generally have anisotropy in addition the crystallographic texture, which causes problems to analyze the stress making use X-ray diffraction, since the  $\varepsilon$  vs  $\sin^2 \psi$  curves become nonlinear. Applying the symmetries from the material in the orthotropic elastic tension was obtained stress-strain relations for orthotropic material, the equations for deformations were found in accordance with the state of triaxial and biaxial principal stresses for the case where the deformations are calculated via XRD. A new equation was proposed for the Poisson coefficient out of the plane in the case of thin films transversely isotropic. A specific case was done by applying the equations to the experimental data in the literature for a thin film of gold with fiber texture  $\{111\}$ , so the value of the Poisson coefficient out of the plane could be calculated in two methods. The first was performed by fitting the experimental data by the least squares method. The second the Poisson coefficient was calculated as an average value on the surface, which was built for the Poisson coefficient out of the plane as a function of  $\sin^2 \psi$  and  $\varepsilon$ .

Key-words: Theory elasticity, residual stresses, X-ray diffraction, orthotropic materials.



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>TEORIA LINEAR DA ELASTICIDADE</b>	<b>17</b>
2.1	Introdução . . . . .	17
2.2	O tensor deformação . . . . .	20
2.2.1	Equações de compatibilidade para as deformações . . . . .	26
2.3	O tensor das tensões . . . . .	29
2.3.1	A Lei de Hooke Generalizada . . . . .	33
2.3.2	Tensões num Plano Inclinado . . . . .	34
2.3.3	Equações de Equilíbrio . . . . .	37
<b>3</b>	<b>TENSÕES RESIDUAIS</b>	<b>39</b>
3.1	Mecanismos de Geração de Tensões Residuais . . . . .	40
3.2	Técnicas de Medição . . . . .	41
3.3	Furo Cego . . . . .	41

	9
3.4 Método por difração de raios X . . . . .	43
3.4.1 Procedimento Básico . . . . .	47
3.4.2 Sistemas de referência em análise de tensões por DRX . . . . .	48
3.4.3 Textura Cristalográfica . . . . .	50
3.4.4 Textura cristalográfica e função de distribuição de orientação (FDO) . . . . .	52
3.4.5 Equações básicas da análise de tensões por difração de raios X . . . . .	54
3.5 Modelos de interação de grão . . . . .	59
3.5.1 Modelo de Voigt . . . . .	59
3.5.2 Modelo de Reuss . . . . .	60
3.5.3 Modelo de Nerfeld-Hill . . . . .	61
<b>4 SIMETRIAS NO TENSOR ELASTICIDADE E CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS</b>	<b>63</b>
4.1 Materiais triclinicos . . . . .	63
4.2 Materiais Ortotrópicos . . . . .	65
<b>5 EQUAÇÕES PARA ANÁLISE DE TENSÕES RESIDUAIS EM MATERIAIS ORTOTRÓPICOS</b>	<b>69</b>
5.1 Introdução . . . . .	69
5.2 Relações tensão-deformação no sistema de coordenadas principal da amostra . . . . .	70
5.3 Equação proposta para o coeficiente de Poisson $\nu_{13}$ . . . . .	74

	10
<b>6 RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>78</b>
6.1 Introdução . . . . .	78
6.2 Cálculo de $\nu_{13}$ médio para um filme fino de Au . . . . .	78
<b>7 CONCLUSÃO</b>	<b>84</b>
<b>Referências bibliográficas</b>	<b>89</b>

# Lista de Figuras

2.1	Curva típica de um ensaio de tração. . . . .	18
2.2	Uma partícula do material sofre uma deformação . . . . .	20
2.3	Alongamento na direção x . . . . .	24
2.4	Distorção no plano xy . . . . .	24
2.5	Um sólido sujeito as forças externas $F_1$ e $F_2$ . . . . .	29
2.6	Sólido de tensões . . . . .	31
2.7	Estado plano de tensão, quando o corpo encontra-se em equilíbrio o somatório de forças e momentos é zero. . . . .	31
2.8	Plano oblíquo BCD . . . . .	34
2.9	Retângulo de arestas h e k sujeitas as tensões normais $(\sigma_{xx})_1$ , $(\sigma_{yy})_2$ , $(\sigma_{xx})_3$ e $(\sigma_{yy})_4$ e cisalhantes $(\tau_{xy})_1$ , $(\tau_{xy})_2$ , $(\tau_{xy})_3$ e $(\tau_{xx})_1$ . . . . .	37
3.1	Efeito das tensões nas linhas de difração. . . . .	44
3.2	Arranjo clássico para medidas da tensão residual por meio de difração de raios X . . . . .	47

3.3	Quando um policristal é submetido a uma tensão (neste caso uma compressão uniaxial paralela a superfície), o espaço interplanar dos planos (hkl) da rede variam com a orientação dos planos da rede com respeito a direção de carregamento. . . . .	47
3.4	Sistemas de referência usados em análise de tensões por DRX. . . . .	49
3.5	Sistemas de referência da amostra (S) e do laboratório (L). . . . .	49
3.6	Filme fino isotrópico de tungstênio, as curvas para as 4 cargas são descritas por retas. . . . .	51
3.7	Filme fino de Au com textura de fibra, o comportamento não linear para os 6 carregamentos se deve ao fato do material apresentar textura cristalográfica. . . . .	51
4.1	Reflexão ao longo do eixo $z$ , $z' \rightarrow -z$ . . . . .	65
6.1	Amostra sujeita a tensão $\sigma_{11}^{tot}$ . . . . .	79
6.2	Deformações em função de $\sin^2 \psi$ ; curvas experimentais (linhas e símbolos cheios) e teóricas (linhas pontilhadas e símbolos abertos). . . . .	80
6.3	Dados experimentais para a curva do trabalho de D. Faurie <i>et al</i> , a reta foi obtida por um ajuste linear, note que devido a anisotropia do material a curva real não é linear. . . . .	81
6.4	Superfície gerada através da equação 6.4 . . . . .	83

## Lista de Tabelas

3.1	Artigos de revisão sobre análise de tensão por difração com uma breve descrição do conteúdo de acordo com várias categorias. . . . .	46
6.1	Cargas aplicadas e tensões aplicadas resultantes ( <b>aparentes</b> ) para o filme de ouro com textura de fibra. . . . .	79
6.2	Valores de $\psi$ e $\sin^2 \psi$ para diferentes planos ( $hkl$ ) para o filme fino de ouro com textura de fibra $\{111\}$ . . . . .	79

# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

Materiais com fins tecnológicos exigem que suas propriedades sejam bem conhecidas, tensões residuais geralmente influenciam as propriedades físicas dos materiais (magnéticas, ópticas, mecânicas, etc.). O estudo das tensões residuais torna-se então parte importante na Ciência e Engenharia de Materiais, uma vez que podem causar efeitos danosos às propriedades esperadas do material em serviço e, num outro ponto de vista, podem ser benéficas, aumentando a resistência do material por exemplo. Neste trabalho, uma análise teórica de tensões em materiais anisotrópicos foi realizada para o caso em que as medidas sejam realizadas por difração de raios X e nêutrons, pois a abordagem considerando materiais isotrópicos se afasta da realidade na maioria dos casos e pode levar a erros significativos nas previsões teórico-experimentais, tanto das constantes elásticas do material, quanto de suas tensões internas e das demais propriedades mecânicas.

Uma revisão da teoria da elasticidade foi desenvolvida no Capítulo 2, visto que a lei de Hooke generalizada serviu de base para representar os estados de tensão principais biaxial e triaxial, no decorrer do Capítulo 2, foram introduzidos os conceitos de deslocamento, deformação e de tensão e suas reespectivas representações tensoriais. Assim, se estabeleceu uma base teórica fundamental utilizada no decorrer do trabalho.

Em seguida no Capítulo 3, o conceito de tensões residuais foi abordado; suas origens, classificações e técnicas experimentais são apresentadas. Em especial foi dada uma atenção maior a duas técnicas de medição; uma destrutiva (Hole drilling) e outra não destrutiva

(difração de raios X pelo método do  $\sin^2 \psi$ ). Esta última foi explorada com maior detalhamento devido à sua relevância no presente trabalho e àquela foi dada uma breve descrição com maior ênfase ao seu desenvolvimento histórico.

As noções de textura cristalográfica e de função de distribuição de orientações (FDO) foram introduzidas para que as expressões das médias tensoriais mecânicas e de difração fossem escritas, bem como as equações básicas para materiais intrínsecamente isotrópicos e intrinsecamente anisotrópicos, nos casos com e sem textura. Deste modo, foi possível aplicar estas ideias nos capítulos subsequentes.

A técnica de  $\sin^2 \psi$  (Capítulo 3) pode ser empregada para determinar as tensões residuais em materiais isotrópicos [1–3], porém, nos casos anisotrópicos ela pode levar a erros consideráveis [4, 5]. Enfatizamos aqui que na técnica de  $\sin^2 \psi$  as tensões residuais em materiais anisotrópicos são determinadas utilizando os fatores de tensão  $F_{ij}$  (Capítulo 3) para caracterizar a anisotropia elástica dos materiais, visto que as curvas de  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  são não-lineares. No presente trabalho, mantêm-se o uso da técnica de  $\sin^2 \psi$  para análise de tensões, todavia, com algumas modificações, o tensor que descreve as propriedades elásticas do material é escrito para o caso de materiais ortotrópicos. Um estudo específico no caso de filmes finos texturados foi então realizado, assim, como as curvas  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$ , comportam-se, em geral, de forma não linear no caso de filmes finos anisotrópicos texturados (transversalmente isotrópicos), atribui-se ao coeficiente de Poisson fora do plano  $\nu_{13}$  o papel de fator anisotrópico que gera esta não linearidade. O coeficiente de Poisson  $\nu_{13}$  presente no coeficiente angular das curvas  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  é então uma função de  $\psi$  e de  $hkl$ .

Em um estudo anterior, publicado pelo grupo de Física Aplicada da Universidade Federal do Espírito Santo [6], o coeficiente de Poisson fora do plano  $\nu_{13}$  foi determinado utilizando o método dos mínimos quadrados para ajustar curvas do tipo  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$ . Neste trabalho, foi obtida uma nova expressão para o coeficiente de Poisson  $\nu_{13}$ , sendo que uma superfície foi gerada para  $\nu_{13}$  em função de  $\psi$  (Capítulo 6) com os resultados experimentais do trabalho de *D. Faurie et al* [1], objetivando então obter o valor médio de  $\nu_{13}^{\psi, hkl}$ , que foi determinado calculando-se seu valor médio na superfície.



## Capítulo 2

# TEORIA LINEAR DA ELASTICIDADE

### 2.1 Introdução

A teoria linear da elasticidade estuda a mecânica dos corpos sólidos, que são considerados como meios contínuos [7]. Trata-se de uma teoria macroscópica, de modo que o raio de ação das interações/forças intermoleculares só se estende às vizinhanças da molécula que as exerce, sendo portanto, muito pequeno comparado com as dimensões do corpo sólido. Aqui, torna-se necessário enumerar algumas considerações sobre as quais a teoria linear da elasticidade se alicerça:

1. O raio de ação das forças moleculares deve ser tomado como zero;
2. Dado um elemento de volume no sólido, então as forças exercidas por este elemento volumar sobre um elemento vizinho agem apenas na superfície do mesmo;
3. Um sólido está regime elástico (lei de Hooke) se as deformações deixam de existir quando as forças exercidas sobre o mesmo cessam;
4. As deformações sofridas pelo sólido são muito pequenas;

5. As deformações são pequenas o suficiente para não mudar o volume do corpo sólido (deformações **isocóricas**).

O regime elástico pode ser exemplificado, do ponto de vista das aplicações em engenharia, por uma curva típica de um ensaio de tração (Figura 2.1). O ensaio de tração consiste na aplicação de carga de tração uniaxial crescente em um corpo de prova específico até a ruptura. Trata-se de um ensaio largamente utilizado na indústria de metal-mecânica, pois tem a vantagem de fornecer dados quantitativos das propriedades mecânicas dos materiais. Quando um corpo de prova é submetido a um ensaio de tração, a máquina de ensaio fornece um gráfico que mostra as relações entre a carga aplicada e as deformações ocorridas durante o ciclo [8].

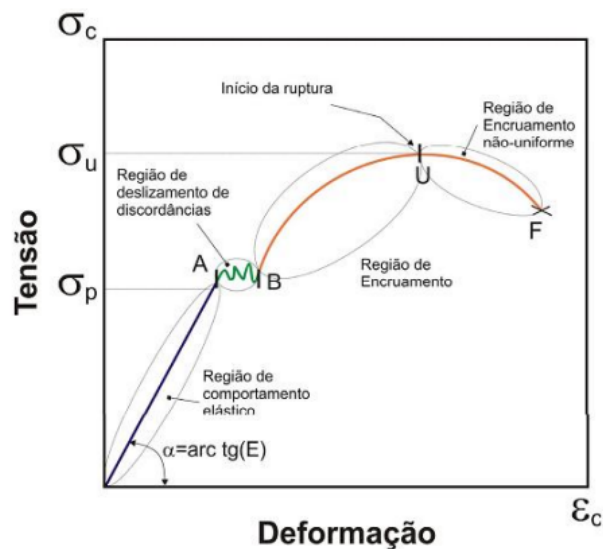


Figura 2.1: Curva típica de um ensaio de tração  $\sigma \times \varepsilon$  [9].

### A região elástica

Na figura 2.1 a região  $OA$  é denominada **região elástica**, isto é, a relação tensão-deformação é linear e não há deformações permanentes, a lei de Hooke é válida

$$\sigma = E\varepsilon. \quad (2.1)$$

A constante  $E$  é o módulo de elasticidade ou módulo de Young, e fornece a rigidez do

material, assim quanto maior for  $E$  menor será a deformação resultante da aplicação de uma tensão. A deformação, ou alongamento, é dada por

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0}, \quad (2.2)$$

onde,  $l_0$  é o *comprimento inicial do corpo de prova* e  $l$  é o *comprimento final para cada carga aplicada*.

### **Limite de proporcionalidade**

Em  $AB$  o limite de escoamento é atingido havendo então o deslizamento de planos e a nucleação e movimentação de discordâncias. Esta região é caracterizada por uma deformação apreciável ao passo que a tensão sofre um aumento pouco significativo. A partir de uma certa tensão a relação entre tensão e deformação já não é mais linear mesmo que não haja deformação permanente, este ponto denomina-se limite de proporcionalidade.

### **Região plástica**

Já na região  $BF$  da figura 2.1 as deformações são permanentes e ocorre o encruamento do material e o aumento da dureza (no caso de um metal, por exemplo). Esta região é denominada de zona plástica. Por fim ocorre a ruptura.

## 2.2 O tensor de deformação

Seja um corpo deformável esquematizado na figura 2.2, também consideremos as coordenadas iniciais do corpo descritas por  $X_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Após uma pequena deformação os pontos do corpo irão se deslocar, e a cada  $\vec{X}$  estará relacionado um novo vetor  $\vec{x}$ , como mostra a figura

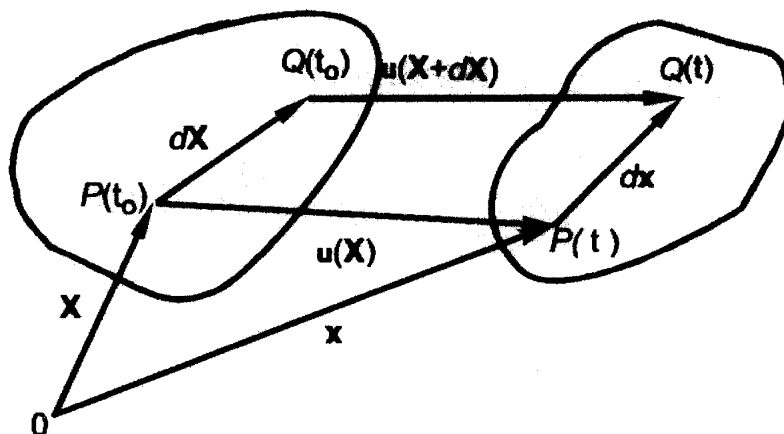


Figura 2.2: Uma partícula do material sofre uma deformação, um ponto  $Q(t_0)$  distante  $dX$  do ponto  $P(t_0)$  antes da deformação se transforma no ponto  $Q(t)$  distante  $dx$  de  $P(t)$ . ref. [10]

O vetor deslocamento é definido como:

$$\vec{u} = \vec{x} - \vec{X} \quad (2.3)$$

onde,  $x$  e  $X$  são as coordenadas espaciais e materiais respectivamente, sendo usada a descrição Lagrangiana de coordenadas, o que equivale a dizer que as coordenadas espaciais ( $x$ ) estão em função das coordenadas materiais ( $X$ ),  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}(X)$ . Desse modo  $\vec{X}$  representa os pontos do meio contínuo no instante  $t=0$  no qual se adotou que a deformação é nula e  $x$  varia com o tempo.

Em um ponto  $Q$ , distante  $d\vec{x}$  de  $\vec{X}$ , podemos escrever para a Equação 2.3:

$$\vec{u}(\vec{x} + d\vec{x}) = \vec{x} + d\vec{x} - (\vec{X} + d\vec{X}), \quad (2.4)$$

subtraindo a Equação 2.4 da Equação 2.3, teremos

$$d\vec{x} = d\vec{X} + \vec{u}(\vec{x} + d\vec{x}) - \vec{u}(\vec{x}), \quad (2.5)$$

mas,

$$\vec{u}(\vec{x} + d\vec{x}) - \vec{u}(\vec{x}) = (\nabla \vec{u}) d\vec{X}, \quad (2.6)$$

substituindo 2.6 em 2.5, tem-se

$$d\vec{x} = [[I] + (\nabla \vec{u})] d\vec{X}, \quad (2.7)$$

onde  $[I]$  é a matriz identidade. Definindo o tensor gradiente de deslocamentos como:

$$[F] = [I] + (\nabla \vec{u}), \quad (2.8)$$

teremos,

$$d\vec{x} = [F] d\vec{X}. \quad (2.9)$$

Veja como fica a equação para o elemento de comprimento. Pela definição:

$$ds^2 = d\vec{x} \bullet d\vec{x} = [F] d\vec{X} \bullet [F] d\vec{X} = d\vec{X} \bullet [F]^T [F] d\vec{X}, \quad (2.10)$$

segue que se  $[F]^T [F] = [I]$ , então não haverá deformação. Analisando o termo  $[F]^T [F]$ , tem-se:

$$[F]^T [F] = \{([I] + [\nabla \vec{u}]^T) ([I] + [\nabla \vec{u}])\} = [I] + [\nabla \vec{u}] + [\nabla \vec{u}]^T + [\nabla \vec{u}]^T [\nabla \vec{u}]. \quad (2.11)$$

Definindo

$$[\varepsilon] = \frac{1}{2} \{[\nabla \vec{u}] + [\nabla \vec{u}]^T + [\nabla \vec{u}]^T [\nabla \vec{u}]\} = \frac{1}{2} ([F]^T [F] - [I]), \quad (2.12)$$

o tensor  $[\varepsilon]$  definido pela Equação 2.12 é chamado de **tensor da deformações de Green-Lagrange**. Ele foi definido por Green e St Venant [11]. Estas deformações são relacionadas a configuração inicial do sólido e medidas em relação ao sistema de coordenadas

nadas iniciais. Escrevendo a equação 2.12 em notação indicial tem-se:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \frac{\partial u_i}{\partial X_j} \right\}. \quad (2.13)$$

As deformações também podem ser representadas em relação a configuração do sólido deformado (descrição Euleriana) como a abaixo

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\}, \quad (2.14)$$

este tensor é chamado de *tensor das deformações de Almansi* [12] e ou componentes "Eulerianas" de deformação e foi introduzido por Cauchy e Almansi. Tanto o *tensor da deformações de Green-Lagrange* quanto o *tensor das deformações de Almansi* são usados na teoria de grandes deformações. Quando a teoria trata de pequenas deformações a multiplicação entre as derivadas dos deslocamentos resulta em uma parcela desprezível de deformação e não há distinção entre o *tensor da deformações de Green-Lagrange* e o *tensor das deformações de Almansi*. Desprezando os termos quadráticos das derivadas do vetor deslocamento na Equação 2.11 e usando a definição de extensão simétrica de um tensor, chega-se ao *tensor infinitesimal de deformação* ou *deformações lineares*, dado por:

$$[\varepsilon] = \frac{1}{2} ([\nabla \vec{u}] + [\nabla \vec{u}]^T) = \frac{1}{2} ([I] - [F]^T [F]). \quad (2.15)$$

Vale destacar que se  $[F]$  pertence ao grupo das matrizes de rotação e translação, isto é, ao grupo  $SO(3)$ , então não haverá qualquer deformação no material. O tensor infinitesimal de deformação é simétrico por definição, e pode ser representado indicialmente como abaixo:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right). \quad (2.16)$$

Ora, se as deformações são infinitesimais, então é razoável fazer que as derivadas com relação a  $X_i$ , sejam, por aproximação, iguais as derivadas com relação a  $x_i$ , com isso, a

Equação 2.16 pode ser reescrita como:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (2.17)$$

ou seja, quando as deformações são pequenas os tensores de Green-Lagrange e de Almansi são os mesmos. A representação matricial do tensor infinitesimal de deformação é dada por

$$\varepsilon_{ij} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Verifica-se que claramente a matriz 2.18 é simétrica. Pode ser mostrado [13] que, sendo conhecidos os alongamentos em três direções perpendiculares e as três deformações angulares relacionadas a estas mesmas direções, o alongamento em qualquer direção e a distorção do ângulo entre duas direções quaisquer podem ser calculados [14]. Sejam conhecidas as componentes do vetor deslocamento em três direções ortogonais entre si, dadas por;  $u_1 = u$ ,  $u_2 = v$ ,  $u_3 = w$ , então, as componentes de deformação, nesse sistema de eixos ortogonais, podem ser encontradas como abaixo.

### Alongamentos

São as deformações nas direções principais  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$  e  $x_3 = z$ , um exemplo de alongamento é mostrado na Figura 2.3, assim, como as deformações são pequenas;  $\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}$ . Os alongamentos nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  são

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}. \quad (2.19)$$

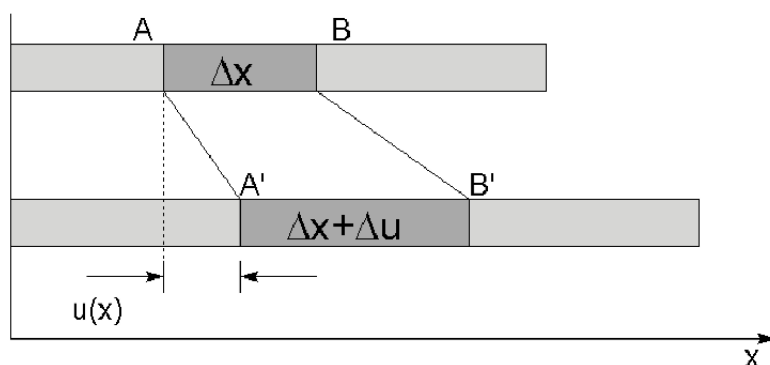


Figura 2.3: Alongamento na direção  $x$  [15].

### Distorções angulares

Tais deformações fazem com o ângulo entre duas direções arbitrárias no sólido mude. Assim as direções principais formam um ângulo diferente de  $\frac{\pi}{2}$  após a deformação. Isso é ilustrado na Figura 2.4.

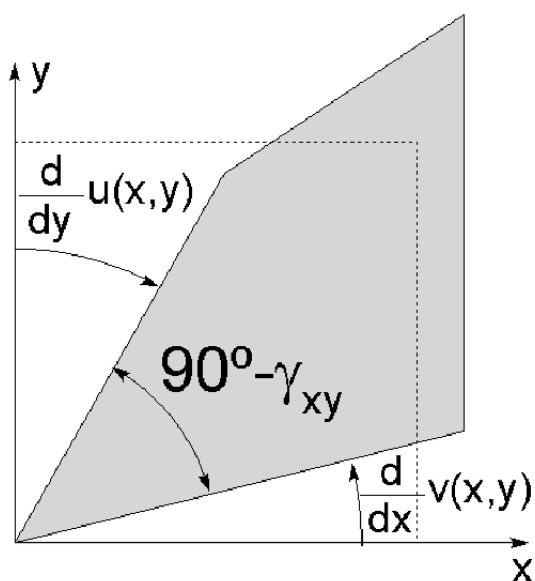


Figura 2.4: Distorção no plano  $xy$  [15].

Pode-se mostrar que  $2\varepsilon_{ij} = \gamma_{ij}$  [10]. Para tanto basta considerar a distorção entre duas direções perpendiculares entre si,  $\hat{y}$  e  $\hat{x}$  por exemplo. Avaliando o produto interno entre os novos elementos infinitesimais (deformados)  $d\vec{x}_1$  e  $d\vec{x}_2$  e usando Equações 2.9 e 2.15, obtêm-se



$$d\vec{x}_1 \bullet d\vec{x}_2 = [F]d\vec{X}_1 \bullet [F]d\vec{X}_2 = d\vec{X}_1 \bullet \overbrace{[F]^T[F]}{=2[\varepsilon]+[I]}d\vec{X}_2 \quad (2.20)$$

$$= d\vec{X}_1 \bullet (2[\varepsilon] + [I])d\vec{X}_2 = d\vec{X}_1 \bullet d\vec{X}_2 + 2d\vec{X}_1 \bullet [\varepsilon]d\vec{X}_2. \quad (2.21)$$

o que finalmente leva ao produto interno para quaisquer direções

$$d\vec{x}_1 \bullet d\vec{x}_2 = d\vec{X}_1 \bullet d\vec{X}_2 + 2d\vec{X}_1 \bullet [\varepsilon]d\vec{X}_2. \quad (2.22)$$

Agora, particularizando para as direções  $x$  e  $y$ . Por simplicidade, considere que  $|d\vec{X}_1| = |d\vec{X}_2| = dX$ , assim  $d\vec{X}_1 = |d\vec{X}|\hat{x}$  e  $d\vec{X}_2 = |d\vec{X}|\hat{y}$ . Com isso a Equação 2.22 torna-se

$$d\vec{x} \bullet d\vec{x} = dx^2 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \gamma\right) = dX^2 \overbrace{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}{=0} + 2dX^2 (\hat{x} \bullet [\varepsilon]\hat{y}), \quad (2.23)$$

daí

$$\left(\frac{dx}{dX}\right)^2 \overbrace{\cos\left(\frac{\pi}{2} - \gamma\right)}{=\sin \gamma} = 2\hat{x} \bullet [\varepsilon]\hat{y}. \quad (2.24)$$

Como  $\gamma$  é muito pequeno, podemos fazer as seguintes aproximações:

- $\sin \gamma = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\gamma^{(2n+1)}}{(2n+1)!} \approx \gamma$ ,
- $\frac{dx}{dX} \approx 1$ .

Feitas as aproximações, a equação 2.24 torna-se

$$\left(\frac{dx}{dX}\right)^2 \sin \gamma = 2\hat{x} \bullet [\varepsilon]\hat{y} = 2\varepsilon_{xy} \approx \gamma. \quad (2.25)$$

Para os demais planos o cálculo é o mesmo, consiste apenas na mudança de índices, assim, de forma geral tem-se:

$$\gamma_{ij} = 2\varepsilon_{ij}; \quad \forall \quad i \neq j, \quad (2.26)$$

ou seja,

$$\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \gamma_{xz} = 2\varepsilon_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}, \quad \gamma_{yz} = 2\varepsilon_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}, \quad (2.27)$$

onde,  $\gamma_{xy}$ ,  $\gamma_{xz}$  e  $\gamma_{yz}$  indicam as distorções angulares entre as direções  $xy$ ,  $xz$  e  $yz$  respectivamente e  $2\varepsilon_{ij} = \gamma_{ij}$  quando  $i \neq j$ . Observe que se  $d\vec{x}_1$  e  $d\vec{x}_2$  tem a mesma direção, então a Equação 2.22 fornece os alongamentos em 2.19:

$$2\hat{x} \bullet [\varepsilon]\hat{x} = \frac{dx^2 - dX^2}{dX^2}. \quad (2.28)$$

### 2.2.1 Equações de compatibilidade para as deformações

Quando se relaciona os deslocamentos  $\{u, v, w\}$  com as deformações obtemos 6 equações (2.19, 2.27), ou seja, as 6 componentes independentes do tensor deformação:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

A solução do sistema de 6 equações deve ser única. Quando o problema inverso é colocado em questão deve-se introduzir algumas equações adicionais. Como no diagrama abaixo:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Estas são chamadas de equações de *compatibilidade de deformações*. Para obtê-las supõe-se que as componentes do campo de deslocamentos  $u, v, w$  e suas derivadas parciais são funções contínuas. Considere a componente  $\sigma_{xy}$  da deformação

$$\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy} = \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.31)$$

derivando  $\gamma_{xy}$  em relação  $x$  e  $y$ , tem-se

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.32)$$

assim,

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} + \frac{\partial^3 v}{\partial x^2 \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (2.33)$$

Como  $\frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon_{xx}$  e  $\frac{\partial v}{\partial y} = \varepsilon_{yy}$ , então

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2}, \quad (2.34)$$

por outro lado, somando a derivada de  $\sigma_{xy}$  com relação a  $x$  e  $z$  com a derivada de  $\sigma_{zx}$  com relação a  $x$  e  $y$ , obtemos

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \gamma_{zx}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (2.35)$$

$$= \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial z \partial y} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial z \partial x} + \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial y \partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y \partial z} \quad (2.36)$$

$$= 2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial z \partial y} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \quad (2.37)$$

das Equações 2.19 e 2.27

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon_{xx} \quad \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \quad (2.38)$$

daí

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \gamma_{zx}}{\partial x \partial y} = 2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial x^2}, \quad (2.39)$$

isolando a derivada parcial de  $\varepsilon_{xx}$

$$2 \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} = - \frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 \gamma_{zx}}{\partial x \partial y}, \quad (2.40)$$

como todos os termos a esquerda possuem derivadas em relação a  $x$ , conclui-se que

$$2\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} \right). \quad (2.41)$$

Esta é uma das 6 relações denominadas de equações de compatibilidade, as demais relações podem ser obtidas por permutação cíclica dos índices [16]. Abaixo seguem as 6 equações de compatibilidade das deformações:

$$\frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2}, \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma_{zx}}{\partial x \partial z} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{zz}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial z^2}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial^2 \gamma_{yz}}{\partial z \partial y} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{zz}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial z \partial y}, \quad (2.44)$$

$$2\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} \right), \quad (2.45)$$

$$2\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial z \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left( -\frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} \right), \quad (2.46)$$

$$2\frac{\partial^2 \varepsilon_{zz}}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial z} \left( -\frac{\partial \gamma_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \gamma_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \gamma_{yz}}{\partial x} \right). \quad (2.47)$$

Para obter o tensor deformação foram usadas ferramentas matemáticas sendo que até aqui, houve apenas a suposição de que o corpo mudou sua forma geométrica sem se saber a causa da mudança. Quando os princípios da mecânica clássica são empregados para analisar a causa da deformação, o conceito de tensão deve ser empregado. O tensor das tensões, suas equações básicas e as relações tensão-deformação serão introduzidos a seguir.

## 2.3 O tensor das tensões

Suponha um sólido qualquer no qual forças externas  $F_1$  e  $F_2$  estejam atuando (Figura 2.5). Seccionando este sólido segundo planos com normais  $\hat{z}$ ,  $\hat{y}$  e  $\hat{x}$  ( Figuras (a), (b) e (c) ), vê-se que forças internas estão distribuídas nestes planos. Por exemplo, sobre o elemento de área  $\Delta A$  com normal  $\hat{z}$  age uma força  $\Delta F$  com direção dada pela Figura 2.5, tal força pode ser decomposta nas suas componentes segundo os eixos  $x, y, z$ , de modo que as componentes  $\Delta F_x$  e  $\Delta F_y$  tangenciam a área  $\Delta A$  e a componente  $\Delta F_z$  tem direção normal a  $\Delta A$ . Para cada uma das direções ortogonais teremos uma componente de força normal e duas tangenciais. Portanto, para cada ponto dos infinitos planos de corte do sólido tem-se duas forças tangenciais (cisalhantes) e uma força normal ao plano. Se a força por unidade de área normal é  $\frac{\Delta F_z}{\Delta A}$ , as forças por unidade de área cisalhante são  $\frac{F_y}{\Delta A}$  e  $\frac{F_x}{\Delta A}$ .

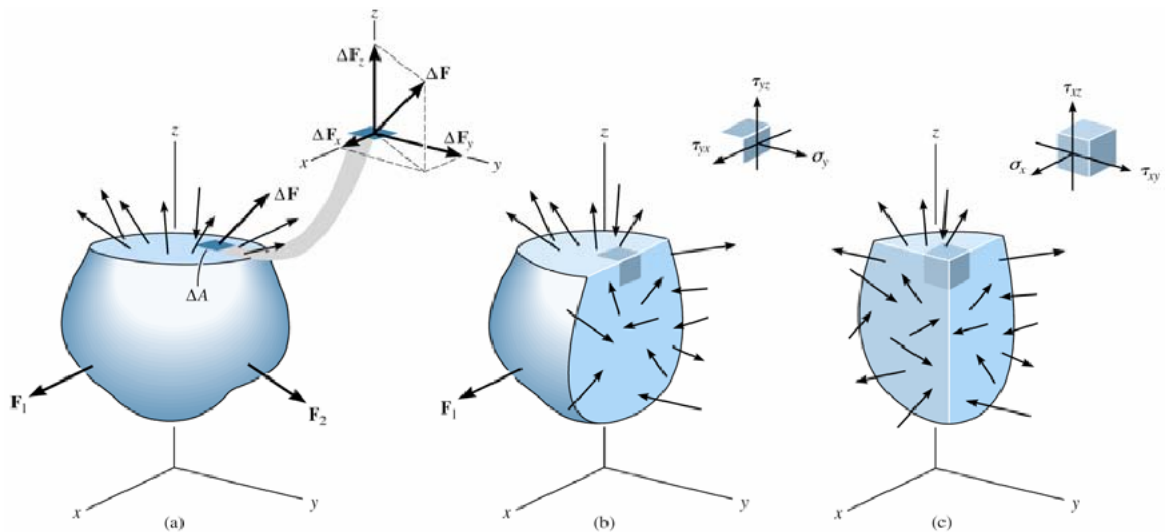


Figura 2.5: Um sólido sujeito as forças externas  $F_1$  e  $F_2$ : (a), planos de corte perpendiculares a  $z$ ,  $y$  e  $x$  reespectivamente. Uma força  $\Delta F$  com direção arbitrária age sobre o elemento de área  $\Delta A$  com normal  $\hat{z}$  [17].

Desta forma, define-se as tensões normais e cisalhantes no elemento de área  $\Delta A \hat{z}$ , como:

### Tensões normais

$$\sigma_{zz} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_z}{\Delta A}. \quad (2.48)$$

### Tensões cisalhantes

$$\tau_{zx} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_x}{\Delta A} \quad e \quad \tau_{zy} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_y}{\Delta A}. \quad (2.49)$$

Generalizando para o espaço tridimensional, o tensor das tensões segundo um sistema ortogonal de coordenadas cartesianas  $\{,x,y,z\}$ , tem sua forma matricial como abaixo:

$$\sigma_{ij} \iff \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

As tensões normais constituem a diagonal da matriz, enquanto as tensões cisalhantes ocupam as posições não diagonais. O tensor das tensões é simétrico e isso pode ser facilmente mostrado, como segue.

### Simetria do tensor das tensões: Teorema de Cauchy

Considere um cubo de dimensões infinitesimais  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$ , cada face possui uma tensão normal e um par de tensões cisalhantes, observe a Figura 2.6, como as dimensões do cubo são ínfimas, as tensões não variam de magnitude nas faces e tão pouco na espessura do cubo, conseqüentemente

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij}. \quad (2.51)$$

Na notação usada para representar o tensor  $\sigma_{ij}$ , discrimina-se que os índices  $i$  e  $j$  indicam o plano e a direção nos quais a tensão está agindo. Realmente, para representar a tensão é necessário conhecer sua magnitude, o plano no qual a tensão está agindo (índice  $i$ ) e sua direção (índice  $j$ ), ou seja, um índice a mais que um tensor de primeira ordem (vetor), que é representado por sua magnitude e direção. Particularmente,  $\tau_{xy}$  representa a tensão cisalhante ao plano com normal  $\hat{x}$  e que age na direção  $y$ . Já  $\tau_{yz}$  é a tensão cisalhante ao plano com normal  $\hat{y}$  agindo na direção  $z$  e assim em diante.

Como o cubo encontra-se em equilíbrio, a soma dos momentos em relação a qualquer eixo é nula. A Figura 2.7 mostra uma particularidade do estado geral de tensões do sólido de tensões acima. O estado plano de tensão no plano  $xy$ , as componentes  $\sigma_{zz}$ ,  $\sigma_{xz}$

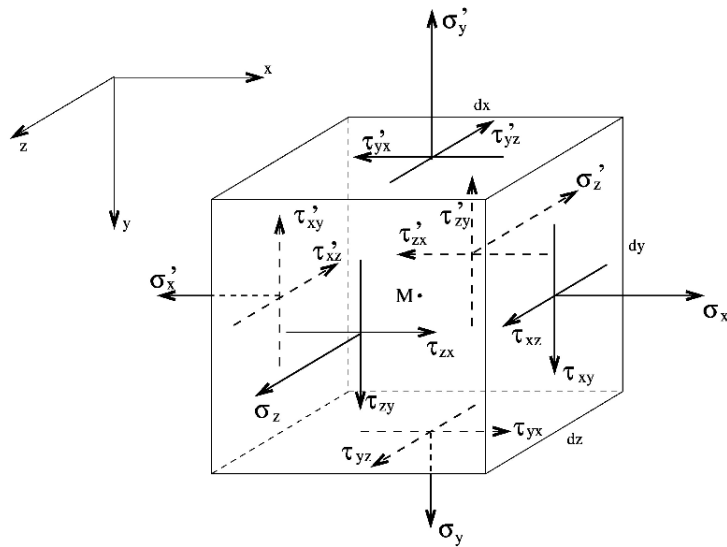


Figura 2.6: Elemento sólido de tensões [18].

e  $\sigma_{yz}$  são nulas. Além disso, as tensões não variam com  $z$  (o estado plano de tensões será discutido ainda neste capítulo).

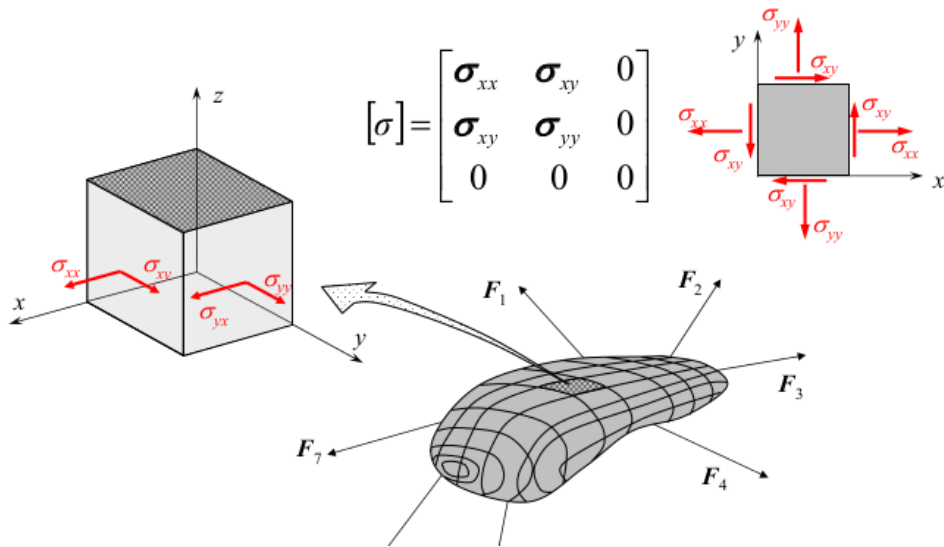


Figura 2.7: Estado plano de tensão, quando o corpo encontra-se em equilíbrio o somatório de forças e momentos é zero ref. [19]

Fazendo a soma dos momentos em torno do eixo  $z$ , tem-se:

$$\{\sigma_{xx} - \sigma_{xx}\}dx \frac{dy}{2} dz + \{-\tau_{xy} + \tau_{yx}\}dxdydz = 0. \quad (2.52)$$

Logo,

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}, \quad (2.53)$$

de modo análogo, tomando os estados planos de tensão no planos  $xz$  e  $yz$  respectivamente, obtêm-se;

$$\tau_{xz} = \tau_{zx}, \quad (2.54)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy}. \quad (2.55)$$

Conclui-se que o tensor das tensões é simétrico, Este resultado é chamado de **teorema de Cauchy** [20] e é vastamente utilizado em teoria da elasticidade e em resistência dos materiais.



### 2.3.1 A Lei de Hooke Generalizada

As relações lineares entre as componentes de tensão e deformação surgem da definição de Green, (como descrito no trabalho de Terzopoulos *et al* [21] para um sólido elástico. A saber, um sólido é dito elástico, quando existe uma energia de deformação  $\phi$  tal que:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (2.56)$$

Sendo que,  $\phi \longrightarrow \phi(\varepsilon_{kl})$ , a expansão para  $\phi$  em torno de zero (deformação nula) é;

$$\phi(\varepsilon_{kl}) = \phi(0) + \phi'(0)\varepsilon_{kl} + \phi''(0)\varepsilon_{kl}^2 + \dots, \quad (2.57)$$

desprezando os termos de ordem maior que dois, chega-se a:

$$\phi(\varepsilon_{kl}) = \phi(0) + \overbrace{\phi'(0)}^0 \varepsilon_{kl} + \phi''(0)\varepsilon_{kl}^2. \quad (2.58)$$

O termo  $\phi'$  é nulo, pois a energia de deformação é mínima quando  $\varepsilon_{kl}$  é zero. Substituindo a Equação 2.58 na Equação 2.56, tem-se:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial(\phi(0) + \phi''(0)\varepsilon_{kl}^2)}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad (2.59)$$

$$\sigma_{ij} = 2\left(\frac{\phi}{\varepsilon_{kl}}\right)\varepsilon_{kl}\delta_{ij} = 2\left(\frac{\phi}{\varepsilon_{kl}}\right)\varepsilon_{ij}, \quad (2.60)$$

isto mostra que a relação entre tensão e deformação é linear quando as deformações são muito pequenas. Generalizando, sendo a constante de proporcionalidade acima diferente para cada direção, há um tensor de ordem 4 relacionando o tensor das tensões e o tensor deformação

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl}\varepsilon_{kl}. \quad (2.61)$$

Esta equação é comumente chamada de *lei de Hooke generalizada*. Segundo esta relação tensão-deformação é válida para cada direção. O tensor  $\Lambda_{ijkl}$  é chamado tensor de elasticidade ou tensor das propriedades elásticas e suas propriedades serão mostradas com maior atenção no Capítulo 4.

### 2.3.2 Tensões num Plano Inclinado

Pretende-se aqui determinar o estado de tensões em um plano oblíquo segundo um eixo de coordenadas  $[x, y, z]$ . Considerando um ponto tensionado  $O$ , sabe-se que infinitos planos passam por este ponto e, para cada um desses planos, assume-se que o estado de tensões é diferente. Para obter a tensão num plano inclinado qualquer, que passe por  $O$ , toma-se um plano  $BCD$  a uma pequena distância de  $O$  como mostra a Figura 2.8. Este plano, juntamente com os planos coordenados, forma um tetraedro  $BCDO$ .

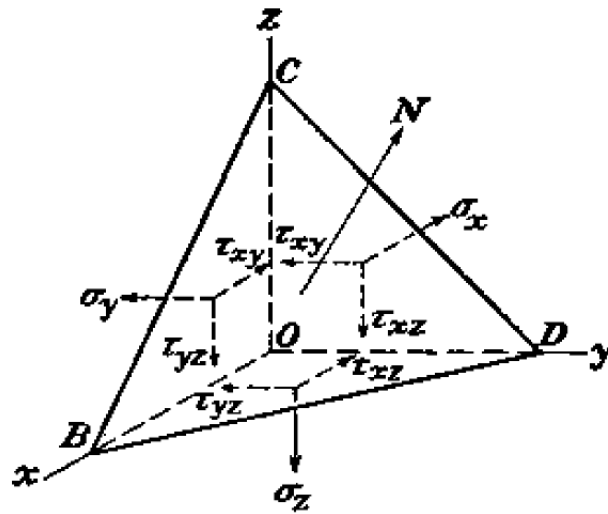


Figura 2.8: Plano oblíquo  $BCD$  (normal  $\vec{N}$ ) a uma pequena distância de um ponto tensionado  $O$  em que as tensões são conhecidas para os planos coordenados  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$  [22].

Se as componentes de tensão  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$ ,  $\tau_{xy}$ ,  $\tau_{xz}$  e  $\tau_{yz}$  são conhecidas, pode-se encontrar o estado de tensão em um plano inclinado qualquer que passe por  $O$ . À medida que o tetraedro  $BCDO$  se torna infinitesimal, o estado de tensão no plano  $BCD$  se aproxima do estado de tensão no plano paralelo passando por  $O$ . Como o tetraedro tem dimensões infinitesimais, pode-se assumir que as tensões não variam no volume do mesmo, ou seja, as tensões são uniformes.

Designando por  $A$  a área da face  $BCD$  do tetraedro, as áreas das outras três faces serão projeções de  $A$  sobre os planos coordenados. Sendo  $\vec{N}$  o vetor unitário normal ao plano  $BCD$ , as áreas das faces  $xy$ ,  $xz$  e  $yz$  serão

$$A_{xz} = A \left( \vec{N} \cdot \hat{y} \right) = A \cos \left( \vec{N}; \hat{y} \right) = Am, \quad (2.62)$$

$$A_{xy} = A \left( \vec{N} \bullet \hat{z} \right) = A \cos \left( \vec{N}; \hat{z} \right) = An, \quad (2.63)$$

$$A_{yz} = A \left( \vec{N} \bullet \hat{x} \right) = A \cos \left( \vec{N}; \hat{x} \right) = Al, \quad (2.64)$$

onde,  $l$ ,  $m$  e  $n$  são os cossenos diretores do vetor normal  $\vec{N}$  no sistema cartesiano. A tensão  $\vec{S}$  que atua no plano  $BCD$  pode ser decomposta em suas componentes cartesianas como

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z). \quad (2.65)$$

A força que atua no plano  $BCD$  na direção de  $x$  será

$$F_x = AS_x. \quad (2.66)$$

As componentes das forças na direção  $x$  nas outras três faces são

*plano  $xy$ :*

$$F_x = -A_{xy}\tau_{xz} = -An\tau_{xz}, \quad (2.67)$$

*plano  $xz$ :*

$$F_x = -A_{xz}\tau_{xy} = -Am\tau_{xy}, \quad (2.68)$$

*plano  $yz$ :*

$$F_x = -A_{yz}\sigma_{xx} = -Al\sigma_{xx}. \quad (2.69)$$

O sinal negativo nas Equações 2.67, 2.68 e 2.69 indica que as tensões agem no sentido negativo de  $x$ . A equação de equilíbrio para a direção  $x$  é

$$AS_x - Al\sigma_{xx} - Am\tau_{xy} - An\tau_{xz} = 0 \quad (2.70)$$

ou seja,

$$S_x = l\sigma_{xx} + m\tau_{xy} + n\tau_{xz} \quad (2.71)$$

As projeções das forças sobre os eixos  $x$  e  $y$  fornecem as outras duas equações de equilíbrio

$$S_y = l\tau_{xy} + m\sigma_{yy} + n\tau_{yz}, \quad (2.72)$$

$$S_z = l\tau_{xz} + m\tau_{yz} + n\sigma_{zz}. \quad (2.73)$$

Por outro lado, pode-se decompor a tensão  $\vec{S}$  em uma componente normal ( $\sigma$ ) e outra paralela ( $\tau$ ) ao plano  $BCD$

$$S^2 = \sigma^2 + \tau^2. \quad (2.74)$$

A componente normal é a projeção de  $\vec{S}$  na direção do vetor normal ao plano  $BCD$

$$\sigma = \vec{S} \bullet \vec{N} = (S_x, S_y, S_z) (l, m, n) = S_x l + S_y m + S_z n. \quad (2.75)$$

Substituindo as equações 2.71, 2.72 e 2.73 em 2.75 tem-se

$$\sigma = l^2\sigma_{xx} + lm\tau_{xy} + ln\tau_{xz} + ml\tau_{xy} + m^2\sigma_{yy} + mn\tau_{yz} + nl\tau_{xz} + nm\tau_{yz} + n^2\sigma_{zz}, \quad (2.76)$$

agrupando os termos, é obtida a seguinte equação:

$$\sigma = l^2\sigma_{xx} + m^2\sigma_{yy} + n^2\sigma_{zz} + 2lm\tau_{xy} + 2ln\tau_{xz} + 2mn\tau_{yz}. \quad (2.77)$$

É interessante obter uma equação que relaciona a tensão num plano qualquer passando por um ponto onde o estado de tensão nos eixos coordenados seja conhecido. Um exemplo é o caso em que uma medida de **difração de raios X** que é feita no sistema de coordenadas do laboratório afim de medir deformações em uma determinada amostra. Assim, como a amostra tem eixos principais de tensão e deformação, é necessário colocar o estado de tensão da amostra no sistema de coordenadas do laboratório. Isto se faz via transformações diádicas do tensor deformação, uma vez que a deformação interplanar da rede cristalina é medida no sistema do laboratório.

### 2.3.3 Equações de Equilíbrio

Por simplicidade, as equações de equilíbrio serão obtidas para um caso bidimensional, sendo então generalizadas para três dimensões.

Considere o equilíbrio de um pequeno bloco retangular de arestas com dimensões  $h$  e  $k$  com espessura unitária com tensões atuando nas faces 1, 2, 3, 4 (Figura 2.9) e forças de massa com componentes  $B_x$  e  $B_y$ .

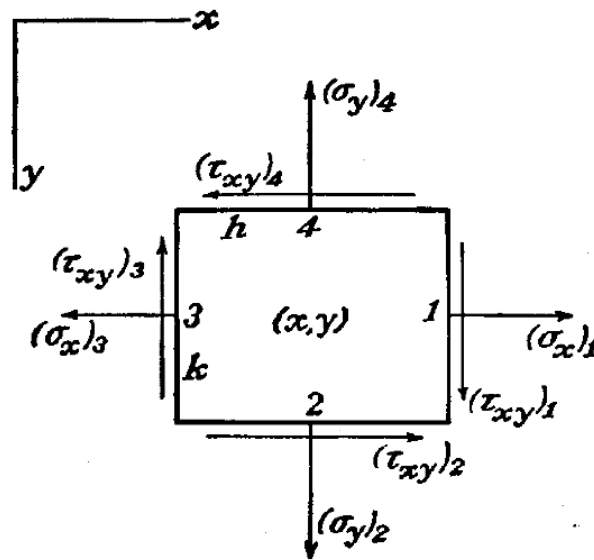


Figura 2.9: Retângulo de arestas  $h$  e  $k$  sujeitas às tensões normais  $(\sigma_{xx})_1$ ,  $(\sigma_{yy})_2$ ,  $(\sigma_{xx})_3$  e  $(\sigma_{yy})_4$  e cisalhantes  $(\tau_{xy})_1$ ,  $(\tau_{xy})_2$ ,  $(\tau_{xy})_3$  e  $(\tau_{xy})_4$  [22].

As tensões nas faces opostas 1 e 3, 2 e 4 não são iguais, pois, a tensão pode variar ao longo do material. Os valores da tensão nos pontos médios de cada face são representados por  $(\sigma_{xx})_1$ ,  $(\sigma_{yy})_2$ ,  $(\sigma_{xx})_3$  e  $(\sigma_{yy})_4$ , etc. Como as faces têm pequenas dimensões, pode-se escrever a força como a multiplicação da tensão no ponto médio da face pela respectiva área da face em que ela atua [22]. Escrevendo a equação de equilíbrio para as forças na direção  $x$ , tem-se

$$[(\sigma_{xx})_1 k - (\sigma_{xx})_3 k + (\tau_{xy})_2 h - (\tau_{xy})_1 h + B_x h k] = 0, \quad (2.78)$$

dividindo por  $hk$ ,

$$\left[ \frac{(\sigma_{xx})_1 - (\sigma_{xx})_3}{h} + \frac{(\tau_{xy})_2 - (\tau_{xy})_1}{k} + B_x \right] = 0. \quad (2.79)$$

Fazendo com que as dimensões do bloco sejam infinitesimais, ou seja,  $h \rightarrow 0$  e  $k \rightarrow 0$ , da definição de derivada, tem-se

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + B_x = 0. \quad (2.80)$$

Analogamente, para a direção y,

$$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + B_y = 0. \quad (2.81)$$

As Equações 2.80 e 2.81 são as equações diferenciais de equilíbrio para casos bidimensionais estacionários. Agora usando a notação de Einstein pode-se extrair as equações para o caso tridimensional estacionário:

$$\partial_j \sigma_{ij} + B_i = 0, \quad i = 1,2,3. \quad (2.82)$$

Quando as tensões variam com o tempo, um termo temporal deve aparecer na equação 2.82, na verdade, basta usar a segunda lei de Newton para concluir que a força por unidade de volume é  $\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$ , onde  $\rho$  é a massa específica, deste modo, a Equação 2.82 toma a forma:

$$\partial_j \sigma_{ij} + B_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad i = 1,2,3, \quad (2.83)$$

ou,

$$\partial_j \sigma_{ij} - \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} + B_i = 0, \quad i = 1,2,3. \quad (2.84)$$

onde  $B_i$  é a i-ésima componente da força de massa.

Em muitos casos, a única força de massa agindo no corpo é seu próprio peso, com isto  $B_y = \rho g$ , e a Equação 2.81 torna-se

$$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + B_y = 0. \quad (2.85)$$

## Capítulo 3

# TENSÕES RESIDUAIS

As tensões residuais são definidas como as tensões que permanecem em um componente na ausência de influências externas como forças, deslocamentos ou gradientes de temperatura. Todas as tensões residuais tem origem em deformações plásticas distribuídas de forma irregular, e estas podem ser geradas de forma **mecânica**, **térmica** ou **metalúrgica**. As resultantes de todas as forças e momentos que as tensões residuais produzem são nulas, portanto, o estado de tensões residuais é denominado de estado auto-equilibrante. Apesar de serem auto-equilibrantes, as tensões residuais não podem ser desprezadas, pois elas se somam às tensões de serviço (externas), podendo ocasionar a diminuição ou até mesmo o aumento da vida útil de componentes [23–25].

As tensões residuais podem ser intrínsecas e extrínsecas de acordo com sua origem:

**Intrínsecas** Surgem durante o crescimento do material e de defeitos relativos a sua estrutura.

**Extrínsecas** Surgem após o crescimento do material, geralmente devido a efeitos térmicos e mecânicos.

Além disso podem ser agrupadas em 3 grupos principais de acordo com sua escala de homogeneidade [26, 27] como segue:

**Tipo 1:** Tensão que varia em uma escala de comprimento de muitos grãos. É por definição independente da orientação dos grãos individuais, conhecida como macrotensão [26]. É considerada homogênea ao longo de um grande número de domínios de cristal do material;

**Tipo 2:** Tensão que varia de grão a grão. É considerada homogênea dentro dos domínios pequenos do cristal do material (um único grão ou fase), este tipo de tensão pode ocorrer, por exemplo, entre diferentes fases que têm propriedades físicas distintas ou entre partículas precipitadas, como inclusões e a matriz, conhecida como microtensão ou tensão intergranular;

**Tipo 3:** Tensão que se origina de defeitos locais e flutua dentro de um grão. Há homogeneidade nos pequenos domínios dos cristais (aproximadamente, distâncias interatômicas), conhecida como submicrotensão.

Raramente um material apresenta isoladamente um único tipo de tensão. Geralmente elas coexistem e se superpõe de modo que, na maioria dos casos, leva-se em conta o tipo de tensão predominante para que o estudo das tensões seja simplificado.

### 3.1 Mecanismos de Geração de Tensões Residuais

Conforme já descrito, as tensões residuais são geradas em um sólido devido a deformação plástica irregular [28]. Estas deformações podem ocorrer no processo de fabricação [29, 30] ou posteriormente, quando a estrutura já encontra-se em serviço [31–33]. A maioria dos processos de fabricação introduz tensões residuais com maior ou menor intensidade, dependendo do processo. Tem-se como exemplo: laminação, fundição, forjamento, estampagem, trefilação, extrusão a frio, dobramento, usinagem, tratamentos térmicos e termoquímicos, soldagem, revestimentos, jateamento e granalhamento. Há também as tensões que surgem devido ao reparos e modificações em serviço [34]. Os mecanismos básicos que geram tensões residuais podem ser classificadas como:



1. Deformação mecânica diferencial;
2. Contração ou expansão térmica diferencial;
3. Variações volumétricas devido à transformação de fase do material;
4. Variações volumétricas devido à diversificação de microconstituintes;
5. Heterogeneidades estruturais em uniões mecânicas.

## 3.2 Técnicas de Medição

*The Handbook of Measurements of Residual Stresses* [35], isto é, O Manual de Medidas de Tensões Residuais, é hoje a mais conceituada referência em técnicas para se medir tensões residuais. Atendendo ao pedido do comitê de Tensões Residuais da SEM (*Society for Experimental Mechanics*) o francês Jian Lu editou o livro . Muitos pesquisadores de vários países contribuíram na elaboração do livro, com colaboração a respeito das principais técnicas: furo-cego, seccionamento, remoção de camadas, difração de raios X, difração de nêutrons, técnicas magnéticas e técnicas de ultra-som. Apenas as técnicas do **furo cego** [36] e de **difração de raios X** [37] são aqui apresentadas por representarem um método destrutivo e um não destrutivo respectivamente e por serem amplamente utilizados em medição de tensões residuais.

## 3.3 Furo Cego

O método do furo cego, também conhecido como *hole-drilling*, consiste basicamente em usinar um furo de pequenas dimensões na região a ser estudada no componente, fazendo com que a região do furo e suas proximidades atinga outro estado de tensões, às custas desta transição, tensões são aliviadas gerando deformações. A medição destas

deformações é realizada por *strain-gages* utilizando extensômetros de resistência elétrica conforme a norma ASTM E-837 [38]. É apresentado abaixo um breve histórico do método do furo cego.

Em 1934, o cientista alemão J. Mathar descreveu em seu artigo tanto a teoria quanto a técnica experimental da medição de tensões residuais a partir da usinagem de um furo [39]. Ele realizou uma medida das tensões residuais com extensômetros mecânicos ao redor de um furo em uma placa tensionada. O experimento consistiu em medir o alívio elástico nas vizinhanças de um furo usinado com 6 mm de diâmetro, por meio de um extensômetro mecânico de 157 mm de comprimento distando 8 mm do centro do furo, em uma placa tensionada uniaxialmente

Em meados da década de 40, os professores W. Soete e R.Vancrombrugge da Ghente University da Bélgica aplicaram extensômetros M E-837 [38] no método. O *strain gage* usado tinha 8 mm de comprimento e o diâmetro do furo 6 mm.

A aplicação moderna do método para medição de tensões residuais uniformes teve início com o trabalho de Rendler *et al* em 1966 [36]. Eles desenvolveram um procedimento sistemático e de fácil reprodução, definiram a configuração das rosetas indicadas pela Norma ASTM 837 e propuseram a adimensionalização dos parâmetros geométricos do método para expandir sua aplicação.

Em 1981, Schajer foi o pioneiro na análise generalizada de elementos finitos para o método [40], obtendo os coeficientes de alívio numericamente. Em 1988, o mesmo Schajer elaborou um trabalho comparativo dos quatro métodos de cálculo de tensões não uniformes ao longo da espessura com a técnica de furo cego [41].

Em 1989, Lu e Flavenot [42] propuseram a eCEXução do furo de forma incremental.

Em 1990, Schajer [43] propôs um procedimento e um algoritmo para tratamento dos dados de deformações causadas pela eCEXução do furo para obtenção das tensões residuais, os quais são usados na Norma ASTM E837;

O método do furo cego é muito usado para a determinação de tensões residuais, por

apresentar mobilidade do equipamento, custos relativamente baixos, além de sua aplicabilidade em diversos materiais.

### 3.4 Método por difração de raios X

“Todos os métodos que determinam as tensões residuais em materiais policristalinos são indiretos, ou seja, eles não medem diretamente a quantidade de interesse, mas algo que é causado por ela. Ao medir tais quantidades, há sempre uma perda de informação, isto significa que nem sempre é possível calcular completamente a tensão interna por meio das quantidades que são medidas. Esta perda de informação depende do método empregado nas medidas; por exemplo, no caso de materiais monofásicos, métodos avançados de difração são capazes de determinar todas as 6 componentes do tensor que descreve a tensão interna; isto não pode ser feito por outros métodos” [44].

Materiais com tensão residual possuem parâmetros de rede diferentes dos materiais livres de tensão. A difração de raios X torna possível medir os parâmetros de rede dos materiais com alta precisão e acurácia além da presença de textura [44] *apud* [45]. Dentre uma série de métodos disponíveis para a análise de tensão, os métodos de difração de raios X, utilizando a radiação característica emitida a partir de um tubo de raios X ou radiação síncrotron (energia média;  $E = 5-15$  keV) são muito adequados para a análise de filmes e de camadas superficiais [4]. Nos últimos anos o desenvolvimento de equipamentos portáteis de raios X têm ampliado a aplicação desta técnica permitindo medidas não destrutivas de tensões em equipamentos industriais [46, 47].

O fato do método de difração de raios X proporcionar uma boa análise em regiões superficiais é descrito no trabalho de Welzel *et al* [4]:

“O comprimento de penetração dos raios X em sólidos é bastante pequeno, limitando as medidas à superfície dos materiais. Porém os métodos de difração de raios X permitem a determinação completa do tensor das tensões para todas as fases do material. Além disso informações adicionais podem

ser obtidas; enquanto a análise de tensões usa os deslocamentos das linhas de difração, as intensidades das linhas de difração contém informações sobre a textura cristalográfica (veja, por exemplo, [48]) e as formas e larguras das linhas de difração contém informações do tamanho (distribuição) dos domínios de difração e a presença de defeitos cristalinos como discordâncias e falhas de empilhamento [49]”.

Uma seleção de artigos de revisão em análise de tensões por difração de raios X nos últimos 30 anos encontra-se na Tabela 3.1 adaptada de [4]. Os artigos desta seleção abordam os materiais de forma geral, portanto, não tratam de nenhuma classe de materiais de forma específica (metais, polímeros e cerâmicos). Trabalhos que tratam as tensões em escalas abaixo das microscópicas [50] exigem um aparato experimental (detectores bidimensionais, radiação branca de luz síncrotron) e análise de dados mais complexos [4], de fato, os artigos de revisão da Tabela 3.1 não estão direcionados para tensões microscópicas, uma vez que, o foco deste trabalho está voltado para tensões mecânicas macroscópicas.

Também é possível fazer análises de microtensões através do alargamento das linhas de difração. Isso pode ser visto no trabalho de Mittemeijer & Scardi, 2004 [51], dentre outros [52, 53]. A Figura 3.1 mostra um pico de difração para o material livre de tensões, em seguida o material sofre compressão, neste caso o pico de difração irá se deslocar para a direita, pois as distâncias interplanares diminuem. No caso seguinte, o material é tensionado e o pico de difração se desloca para a esquerda.

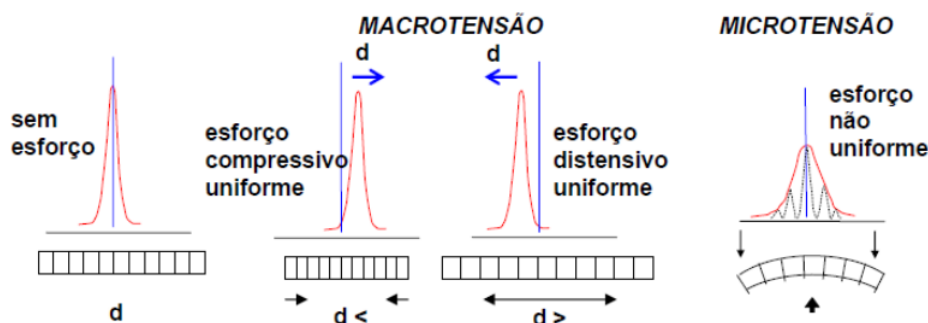


Figura 3.1: Efeito das tensões nas linhas de difração, o ângulo  $\theta$  aumenta para a direita [6].

O comportamento mostrado na Figura 3.1 pode ser explicado pela lei de Bragg, no caso do material livre de tensão, tem-se

$$n\lambda = 2d_0 \sin \theta_0, \quad (3.1)$$

onde  $n$  é a ordem de difração,  $d_0$  a distância interplanar na ausência de tensão, e  $\theta_0$  o ângulo de difração. No caso de compressão a distância interplanar irá diminuir para um valor  $d'$ , e o ângulo de difração será  $\theta'$ , ou seja

$$\theta_0 = \arcsin \left( \frac{n\lambda}{2d_0} \right) < \arcsin \left( \frac{n\lambda}{2d'} \right) = \theta'. \quad (3.2)$$

Conclui-se assim que o ângulo de difração irá aumentar e o pico será deslocado para a direita. De forma análoga, no caso de tração o pico se desloca para a esquerda. Se por um lado as macrotensões deslocam os picos de difração (esquerda ou direita), as microtensões causam um alargamento do mesmo, a difração ocorre num intervalo maior de ângulos, devido a forma não homogênea com que as distâncias interplanares são alteradas.

Tabela 3.1: Artigos de revisão sobre análise de tensão por difração com uma breve descrição do conteúdo de acordo com várias categorias. (adaptado de ref. [4])

Referência	Foco	Fundamentos	Caso elasticamente isotrópico	Caso elasticamente anisotrópico (textura)
Noyan <i>et al</i> (1995) [54]	Análise de tensões em filmes fino por difração de raios X; filmes policristalinos e epitaxiais	Origens da tensão; tipos de tensão residual (macro <i>versus</i> micro); estado de tensões em filmes finos	Tratamento básico	-
Eigenmann & Macherauch (1995) [55]	Análise de tensões por difração de raios X; amostras mono e policristalinas	Revisão histórica; tipos de tensão residual (macro <i>versus</i> micro)	Tratamento completo; cálculo das constantes elásticas de raio-X	-
Hauk (1995) [56]	Análise de tensões por difração de raios X e de nêutrons; amostras policristalinas	Breve introdução	Breve introdução	Apenas mencionado; sem detalhes
Dölle (1979) [57]	Análise de tensões por difração de raios X; amostras policristalinas	Breve introdução e revisão Histórica	Tratamento completo; cálculo das constantes elásticas de raio-X	Tratamento simplificado (assumindo o modelo de interação de grãos de Reuss)
Welzel <i>et al</i> [4]	Análise de tensões por difração de raios X; filmes finos policristalinos e regiões superficiais	Tratamento completo	Tratamento completo; cálculo das constantes elásticas	Tratamento completo; revisão sobre os modelos de interação de grão

### 3.4.1 Procedimento Básico

Um arranjo clássico para difração de raios X está representado na Figura 3.2, uma fonte de radiação monocromática é usada para irradiar a amostra e o detector registra a intensidade da radiação de raios X que sofrem difração na amostra.

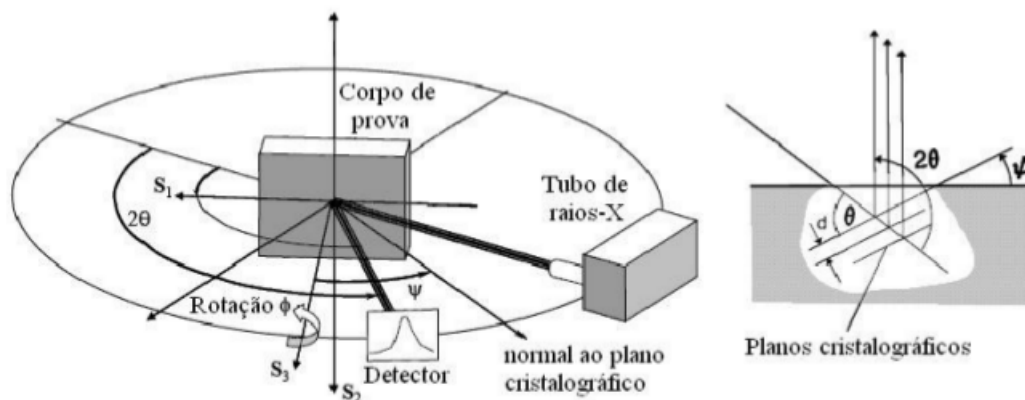


Figura 3.2: Arranjo clássico para medidas da tensão residual por meio de difração de raios X, os eixos  $S_1, S_2$  e  $S_3$  constituem o sistema de coordenadas da amostra [58].

A idéia básica da análise de tensão por difração está esquematizada na figura 3.3, onde é assumido que a amostra policristana está sujeita a uma tensão compressiva paralela a superfície.

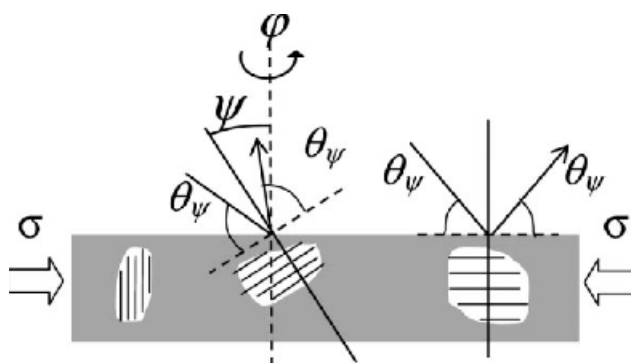


Figura 3.3: Quando um policristal é submetido a uma tensão (neste caso uma compressão uniaxial paralela a superfície), o espaçamento interplanar dos planos (hkl) da rede variam com a orientação dos planos da rede com respeito a direção de carregamento. Esta dependência da deformação da rede com a direção pode ser medida por difração de raios X. A deformação é medida na direção do vetor de difração e é identificada pelos Ângulos  $\varphi$  e  $\psi$ , onde  $\varphi$  é o ângulo de rotação da amostra em torno da normal à superfície da amostra e  $\psi$  é o ângulo de inclinação entre a normal à superfície da amostra e o vetor de difração [4].

O espaçamento dos planos (hkl) da rede vai depender da orientação dos grãos na amostra

com respeito ao sistema de coordenadas da amostra [4]. A distância interplanar é medida na direção do vetor de difração; para calcular a deformação dos planos (hkl) usa-se a equação

$$\varepsilon^{hkl} = \frac{d^{hkl} - d_0^{hkl}}{d_0^{hkl}}, \quad (3.3)$$

onde  $d_0^{hkl}$  é a distância dos planos (hkl) quando a amostra está livre de tensões.

A direção da medida experimental das deformações é definida pelos ângulos  $\varphi$  e  $\psi$ , onde  $\psi$  é o ângulo de inclinação da normal a superfície da amostra com relação ao vetor de difração e  $\varphi$  é o ângulo de rotação em torno da normal a superfície da amostra (figuras 3.2 e 3.3). Em geral as deformações medidas por difração de raios X na direção caracterizada pelos ângulos  $\varphi$  e  $\psi$  não são iguais as deformações mecânicas na mesma direção. De fato, as linhas de difração contêm informações apenas dos cristalitos que tem seus planos (hkl) perpendiculares ao vetor de difração, ou seja, apenas um subgrupo de cristalitos irão contribuir na medida das deformações da rede. A deformação mecânica é a deformação média de todos os cristalitos da amostra, enquanto a deformação medida por difração representa um subgrupo de cristalitos compondo a amostra. É importante distinguir médias de difração numa dada direção de médias mecânicas nessa mesma direção [4].

### 3.4.2 Sistemas de referência em análise de tensões por DRX

Os sistemas de referência usados em análise de tensões por DRX são:

Sistema de referência do cristal (K); Para cristais com simetria cubica, os eixos são escolhidos de forma a coincidir com os eixos  $a$ ,  $b$  e  $c$  da estrutura cristalina (figura 3.4).

Sistema de referência da amostra (S); O eixo  $S_3$  é perpendicular a superfície da amostra e os eixos  $S_1$  e  $S_2$  pertencem ao plano da superfície. No caso de amostras com orientação preferencial, o eixo  $S_1$  é geralmente escolhido para coincidir com esta direção preferencial. Um conjunto de eixos especial da amostra é o sistema de coordenadas principal (P) (sistema no qual o tensor das tensões é escrito), neste sistema as únicas componentes diferentes de zero são  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$  e  $\sigma_{33}$ .



Sistema de referência do laboratório (L); Este sistema é escolhido de forma que o eixo  $L_3$  esteja na direção do vetor de difração, assim quando  $\varphi = \psi = 0$  o sistema de coordenadas do laboratório (L) coincide com o sistema de coordenadas da amostra (S).

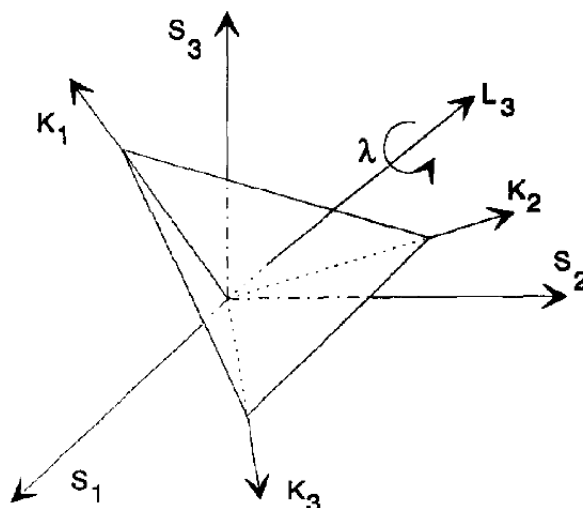


Figura 3.4: Sistemas de referência usados em análise de tensões por XRD; em redes cúbicas as direções [100], [010] e [001] formam o sistema de coordenadas do cristal (K), o eixo  $L_3$  coincide com o vetor de difração, uma rotação de  $\lambda$  em torno de  $L_3$  pode alinhar a normal ao plano (hkl) com o eixo  $L_3$ , as diversas orientações dos cristalitos dependem de  $\lambda$ , mais especificamente, os cristalitos que contribuem para a medida de difração devem ter o vetor de difração na direção de  $L_3$  [44].

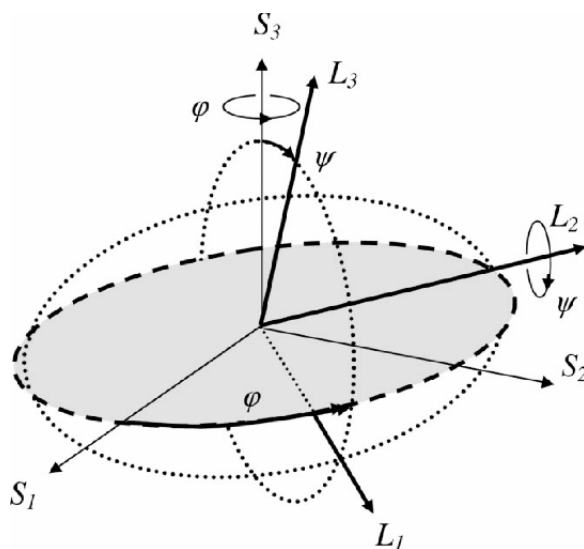


Figura 3.5: Sistemas de referência da amostra (S) e do laboratório (L) [4].

No que segue, os sobrescritos K, S (P) e L serão usados para indicar o sistema de referência empregado para representar os tensores.

### 3.4.3 Textura Cristalográfica

Os metais comumente utilizados são materiais policristalinos, que são constituídos por pequenos cristais separados por fronteiras denominadas contornos de grão. Os pequenos cristais são chamados de cristalitos (ou grãos). O tamanho médio dos grãos está entre  $10\mu$  e  $1mm$  para a maior parte dos materiais.

Um grão do agregado policristalino geralmente têm orientação cristalina distinta de seus demais vizinhos. O modo como estes grãos estão orientados afeta diretamente as propriedades físicas do policristal. Quando estas orientações estão concentradas em torno de alguma ou algumas orientações específicas (do ponto de vista global), o policristal possui *orientação preferencial* ou equivalentemente, *textura cristalográfica*. A textura cristalográfica pode ser definida como uma não aleatoriedade da distribuição de orientações dos grãos de um policristal. De fato, quando os grãos do agregado possuem propriedades idênticas (isotropia intrínseca) e, além disso, têm orientação cristalina distribuída aleatoriamente, então o material material é dito **macroscopicamente isotrópico**. Materiais que apresentam esta característica são denominados *quasi-isotrópicos*. Uma característica interessante dos materiais quasi-istrópicos é o fato de que, mesmo que cada grão apresente anisotropia nas propriedades elásticas (anisotropia intrínseca) , o policristal será macroscopicamente isotrópico para uma distribuição aleatória dos grãos. Vale destacar, que a textura se refere a forma como a estrutura cristalina dos grãos está arranjada e não à forma dos grãos em si (grãos alongados, elípticos, esféricos, etc.).

#### Influência da Textura em Difração de raios X

A textura cristalográfica influencia medidas de difração de raios X [44, 59]. Isto fica evidenciado no trabalho de Faurie *et al* [2] que usa a difração de raios X para medir as constantes elásticas dos filmes finos policristalinos de tungstênio e do ouro. As Figuras 3.6 e 3.7, obtidas no trabalho de Faurie *et al* [2], mostram as curvas de  $\varepsilon$  vs  $\sin^2 \psi$  para os filmes finos de tungstênio (isotrópico/sem textura) e de ouro (com textura de fibra) respectivamente. As amostras são de filmes finos (tungstênio ou ouro) sobre um substrato de contantes elásticas conhecidas, foram sujeitas às tração  $(T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6)$ . Medidas

de difração de raios X foram realizadas para medir as deformações que fornecem a tensão média ao longo do vetor de difração para os cristalitos que contribuem na medida. Uma vez conhecidas as constantes elásticas de bulk, encontrou-se as constantes elásticas do filme fino. Nota-se que o comportamento dos dois filmes é distinto. A curva  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  para o tungstênio (figura 3.6) apresentou uma relação linear entre a deformação  $\varepsilon$  e  $\sin^2 \psi$ .

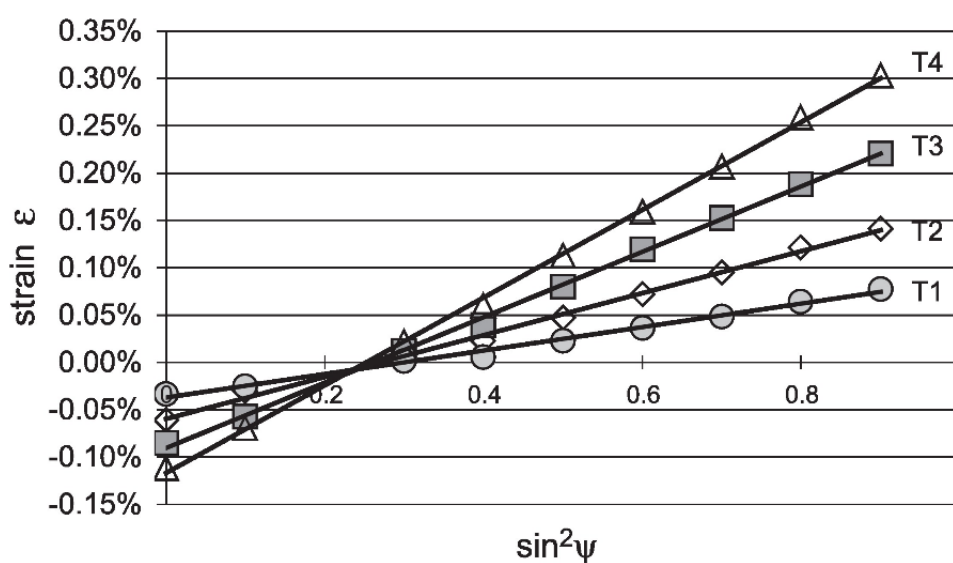


Figura 3.6: Filme fino isotrópico de tungstênio, as curvas para as 5 cargas são descritas por retas [2].

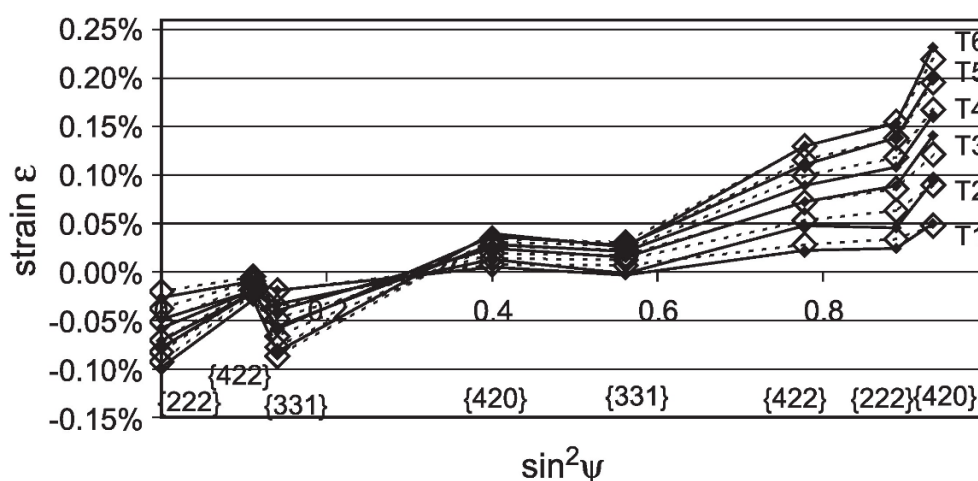


Figura 3.7: Filme fino de Au com textura de fibra, o comportamento não linear para os 5 carregamentos se deve ao fato do material apresentar textura cristalográfica [2].

Por outro lado, a curva do filme fino texturado de ouro (figura 3.7) apresentou um comportamento não linear. Estes resultados exemplificam o fato de que as curvas ( $\varepsilon$  vs

$\sin^2 \psi$ ) são realmente influenciadas pela presença de textura.

A não linearidade das curvas de  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  não está necessariamente relacionada a presença de uma forte textura cristalográfica. Outra possível razão é a presença de tensões cisalhantes não nulas do tipo  $\sigma_{23}$  ou  $\sigma_{31}$  (o eixo  $S_3$  é normal a superfície da amostra). Na superfície estas tensões devem ser zero. Mas neste experimento a radiação tem um comprimento de penetração da ordem de micrometros [44].

A análise das tensões residuais presentes nos dois filmes deverá ser distinta. O filme sem textura é quasi-isotrópico, ou seja, seus grãos têm orientações aleatórias e consequentemente as constantes elásticas são as mesmas para todas as direções. Obviamente o filme fino com textura de fibra irá exigir um método alternativo para medição de suas tensões residuais [2, 6, 60].

### 3.4.4 Textura cristalográfica e função de distribuição de orientação (FDO)

A orientação dos cristalitos em relação ao sistema de coordenadas da amostra (S) é definida pelos ângulos de Euler  $(\alpha, \beta, \gamma)$ . Estes ângulos podem ser associados a um vetor  $\vec{g} = (\alpha, \beta, \gamma)$  no espaço tridimensional de orientações (G). Cada ponto no espaço de orientações representa uma orientação do sistema de referência do cristal (K) com respeito ao sistema de referência da amostra (S) [4]. A textura pode ser quantificada introduzindo a função de distribuição de orientação (FDO)  $f(\alpha, \beta, \gamma)$ . Suponha que  $g_{\psi\varphi}$  seja a orientação de um cristalito particular para o qual a família de planos  $\{hkl\}$  é normal a direção de  $L_3$  (Figura 3.4). A função de distribuição de orientações específica (FDO) a fração volumar dos cristalitos que tem orientações no intervalo infinitesimal de orientação  $d^3g = \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma$  em torno de  $\vec{g}$ , ou seja

$$\frac{dV}{V} = \frac{f(\vec{g})}{8\pi^2} d^3g = \frac{f(\alpha, \beta, \gamma)}{8\pi^2} \sin(\beta) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (3.4)$$

com a condição de normalização

$$\iiint_G [f(\vec{g})/8\pi^2] d^3g = 1. \quad (3.5)$$

A média mecânica e de difração dos tensores são geralmente calculadas no espaço das orientações (ou espaço de Euler) (G). Como dito anteriormente, a média de um tensor sobre todos os cristalitos do agregado policristalino é a média mecânica. Considere um tensor  $\Omega$ , a sua média mecânica é dada por

$$\langle \Omega \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \iiint_G \Omega(\vec{g}) f(\vec{g}) d^3g = \frac{1}{8\pi^2} \int_{\gamma=0}^{2\pi} \int_{\beta=0}^{\pi} \int_{\alpha=0}^{2\pi} \Omega(\alpha, \beta, \gamma) f(\alpha, \beta, \gamma) \sin(\beta) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (3.6)$$

onde  $\Omega(\alpha, \beta, \gamma)$  é a média para todos os grãos com uma orientação particular na amostra, nesta notação os brackets  $\langle \dots \rangle$  indicam as médias mecânicas.

Por outro lado as chaves  $\{ \dots \}$  indicam as médias com respeito a medida de difração, pois, as linhas de difração contêm apenas informações do subconjunto de cristalitos que têm os planos perpendiculares a direção escolhida para a medida. Um grau de liberdade surge, quando rotacionamos a amostra em torno de  $L_3$  de um ângulo  $\lambda$  (figura 3.4). Outros cristalitos possivelmente irão contribuir na medida, sendo que, desta forma, deve-se incluir  $\lambda$  como um grau de liberdade. Porém, os ângulos de Euler tratam da orientação do sistema do cristal com respeito ao sistema da amostra e, portanto, não são parâmetros experimentais. Entende-se que é preciso expressar a média das medidas de difração com respeito a tais parâmetros, assim

$$\{\Omega\}_{\varphi\psi}^{hkl} = \frac{\int_0^{2\pi} \Omega(hkl, \lambda, \varphi, \psi) f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda}{\int_0^{2\pi} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi)}, \quad (3.7)$$

$f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi)$  é a representação da FDO em termos dos parâmetros experimentais  $(hkl, \varphi, \psi)$  e do ângulo de rotação  $\lambda$ . Algumas transformações são necessárias e serão omitidas aqui

(para maiores detalhes veja Leoni *et al* (2001) [3]). A equação para a deformação média na direção de  $L_3$  é mostrada abaixo

$$\{\varepsilon_{33}^L\}_{\varphi\psi}^{hkl} = \frac{\int_0^{2\pi} \varepsilon_{33}^L(hkl, \lambda, \varphi, \psi) f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda}{\int_0^{2\pi} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda}. \quad (3.8)$$

### 3.4.5 Equações básicas da análise de tensões por difração de raios X

#### Amostras elasticamente isotrópicas

Os materiais policristalinos podem apresentar cristalitos elasticamente isotrópicos, ou seja, todos os cristalitos possuem as mesmas propriedades elásticas em um sistema arbitrário de coordenadas. A lei de Hooke relacionando a deformação mecânica com a tensão mecânica é

$$\langle \varepsilon_{ij}^S \rangle = S_{ijkl}^S \langle \sigma_{kl}^S \rangle, \quad (3.9)$$

sendo que a convenção de Einstein é usada. Como as propriedades de cada cristalitos são iguais as propriedades de bulk, o tensor compliança  $S_{ijkl}^S$  representado no sistema de coordenadas da amostra (S) é igual ao tensor compliança representado no sistema de coordenadas do cristal (K), obtêm-se então

$$\langle \varepsilon_{ij}^S \rangle = S_{ijkl}^S \langle \sigma_{kl}^S \rangle = S_{ijkl}^K \langle \sigma_{kl}^S \rangle, \quad (3.10)$$

e de acordo com Welzel *et al* [4] *apud* [61], a deformação irá depender apenas de duas constantes elásticas independentes  $S_1$  e  $S_2$

$$\langle \varepsilon_{ij}^S \rangle = \left[ S_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{2} S_2 \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \right] \langle \sigma_{kl}^S \rangle. \quad (3.11)$$

A equação 3.11 é válida para o bulk (material macroscópico), porém também é válida para cada cada cristalito e para as deformações medidas por difração de raios X.

No caso isotrópico, a média dos tensores é a mesma para o bulk e para os cristalitos individuais, portanto, somente neste caso, as médias mecânicas  $\langle \Omega \rangle$  são iguais as médias de difração  $\{\Omega\}_{\varphi\psi}^{hkl}$ , por isso, os símbolos  $\langle \dots \rangle$  e  $\{\dots\}$  podem ser omitidos.

As constantes  $S_1$  e  $S_2$  estão relacionadas ao módulo de Young e ao coeficiente de Poisson da amostra como abaixo

$$S_1 = -\frac{\nu}{E}, \quad (3.12)$$

e

$$\frac{1}{2}S_2 = \frac{(1 + \nu)}{E}. \quad (3.13)$$

No caso isotrópico vale a relação

$$\varepsilon_{\varphi\psi}^{hkl} = \{\varepsilon_{33}^L\}_{\varphi\psi}^{hkl} = \varepsilon_{33}^L = \langle \varepsilon_{33}^L \rangle. \quad (3.14)$$

A deformação pode ser descrita no sistema de coordenadas do laboratório. Para tanto basta achar o tensor  $\langle \varepsilon_{33}^L \rangle$  na direção de  $L_3$

$$\langle \varepsilon_{33}^L \rangle = m_i^S \langle \varepsilon_{ij}^S \rangle m_j^S, \quad (3.15)$$

onde  $m_i^S$  são as componentes do vetor unitário ( $\hat{m}$ ) na direção do vetor de difração (ou equivalentemente, na direção de  $L_3$ ), o vetor unitário  $\hat{m}$  é dado por

$$\hat{m} = \begin{pmatrix} \sin \psi \cos \varphi \\ \sin \psi \sin \varphi \\ \cos \psi \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

logo,

$$\begin{aligned}
& \langle \varepsilon_{33}^L \rangle = \\
& = \sin^2 \psi \cos^2 \varphi \langle \varepsilon_{11}^S \rangle + \sin^2 \psi \sin \varphi \cos \varphi \langle \varepsilon_{12}^S \rangle + \sin \psi \cos \psi \cos \varphi \langle \varepsilon_{13}^S \rangle \\
& + \sin^2 \sin \varphi \cos \varphi \langle \varepsilon_{21}^S \rangle + \sin^2 \psi \sin^2 \varphi \langle \varepsilon_{22}^S \rangle + \sin \psi \cos \psi \sin \varphi \langle \varepsilon_{23}^S \rangle \\
& + \sin \psi \cos \cos \varphi \langle \varepsilon_{31}^S \rangle + \sin \psi \cos \psi \sin \varphi \langle \varepsilon_{32}^S \rangle + \cos^2 \psi \langle \varepsilon_{33}^S \rangle, \tag{3.17}
\end{aligned}$$

daí

$$\begin{aligned}
& \langle \varepsilon_{33}^L \rangle = \\
& = \sin^2 \psi \cos^2 \varphi \langle \varepsilon_{11}^S \rangle + \sin^2 \psi \sin^2 \varphi \langle \varepsilon_{22}^S \rangle + \cos^2 \psi \langle \varepsilon_{33}^S \rangle \\
& + \sin^2 \psi \sin (2\varphi) \langle \varepsilon_{12}^S \rangle + \cos \varphi \sin (2\psi) \langle \varepsilon_{13}^S \rangle + \sin \varphi \sin (2\psi) \langle \varepsilon_{23}^S \rangle, \tag{3.18}
\end{aligned}$$

substituindo a equação 3.11 em 3.18, tem-se a *lei de*  $\sin^2 \psi$

$$\begin{aligned}
& \langle \varepsilon_{33}^L \rangle = \\
& = \frac{1}{2} S_2 \sin^2 \psi [\cos^2 \varphi \langle \sigma_{11}^S \rangle + \sin (2\varphi) \langle \sigma_{12}^S \rangle + \sin^2 \varphi \langle \sigma_{22}^S \rangle] \\
& + \frac{1}{2} S_2 [\cos \varphi \sin (2\psi) \langle \sigma_{13}^S \rangle + \sin \varphi \sin (2\psi) \langle \sigma_{23}^S \rangle + \cos^2 \psi \langle \sigma_{33}^S \rangle] \\
& + S_1 (\langle \sigma_{11}^S \rangle + \langle \sigma_{22}^S \rangle + \langle \sigma_{33}^S \rangle). \tag{3.19}
\end{aligned}$$



A equação 3.19 é chamada de lei do  $\sin^2 \psi$  e foi introduzida na literatura primeiramente por Macherauch & Müller (1961) [62]. O nome lei do  $\sin^2 \psi$  vem do fato de que se o sistema adotado para a amostra for o sistema principal (P) (no qual  $\sigma_{ij}^P = 0$  para todo  $i \neq j$ , neste sistema as tensões cisalhantes são nulas.), então para cada  $\varphi$  fixo se estabelece uma relação de proporcionalidade entre  $\sin^2 \psi$  e as deformações. Para amostras isotrópicas o gráfico da deformação em função de  $\sin^2 \psi$  para  $\varphi$  constante é uma reta. Das inclinações dessas retas, a  $\varphi$  constante, obtêm-se as componentes da tensão. No estudo de caso, em que existem tensões cisalhantes, a orientação do sistema principal (P) de coordenadas é desconhecido. Vale destacar que, para um agregado policristalino, sujeito a um campo homogêneo de tensões e consistindo de cristalitos elasticamente isotrópicos, a equação 3.19 é válida mesmo na presença de textura.

### Amostras elasticamente quasi-isotrópicas

Quando o agregado policristalino possui cristalitos elasticamente anisotrópicos, porém seu comportamento macroscópico é isotrópico (constantes de bulk iguais em diferentes direções), diz-se que o material é *quasi-isotrópico*. Isso geralmente ocorre, quando os cristalitos têm orientações aleatórias no material. Neste caso a lei de  $\sin^2 \psi$  (equação 3.19) deve sofrer alterações, uma vez que, sendo diferentes as constantes elásticas de cada cristalito, as constantes  $S_1$  e  $S_2$  irão depender de  $hkl$ . Com isso tem-se as constantes  $S_1^{hkl}$  e  $S_2^{hkl}$  no lugar de  $S_1$  e  $S_2$  reespectivamente, como abaixo:

$$\begin{aligned} \{\varepsilon_{33}^L\}_{\varphi\psi}^{hkl} &= \\ &= \frac{1}{2} S_2^{hkl} \sin^2 \psi [\cos^2 \varphi \langle \sigma_{11}^S \rangle + \sin(2\varphi) \langle \sigma_{22}^S \rangle + \sin^2 \varphi \langle \sigma_{33}^S \rangle] \\ &+ \frac{1}{2} S_2^{hkl} [\cos \varphi \sin(2\psi) \langle \sigma_{13}^S \rangle + \sin \varphi \sin(2\psi) \langle \sigma_{23}^S \rangle + \cos^2 \psi \langle \sigma_{33}^S \rangle] \\ &+ S_1^{hkl} (\langle \sigma_{11}^S \rangle + \langle \sigma_{22}^S \rangle + \langle \sigma_{22}^S \rangle + \langle \sigma_{33}^S \rangle). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Note que no caso quasi-isotrópico

$$\langle \varepsilon_{33}^L \rangle \neq \{ \varepsilon_{33}^L \}_{\varphi\psi}^{hkl}, \quad (3.21)$$

ou seja, as médias mecânicas são diferentes das médias de raios X.

### Amostras macroscopicamente elasticamente anisotrópicas - caso de textura

Para um agregado policristalino consistindo de cristalitos elasticamente anisotrópicos, a presença de textura faz com que o material seja macroscopicamente anisotrópico. A equação 3.19 foi elaborada com base na isotropia dos cristalitos e a equação 3.20 com base no fato do material possuir cristalitos com propriedades distintas (anisotropia), porém, na ausência de textura. Portanto, no caso de materiais com anisotropia intrínseca (cristalitos anisotrópicos) e com textura, as equações 3.19 e 3.20 não são válidas. Neste contexto, surgiram os **modelos de interação de grão** (*grain interaction models*) e os fatores de tensão de raios X  $F_{ij}(\psi, \varphi, hkl)$  (*X-ray stress factors - XSF*) para analisar as tensões em materiais macroscopicamente anisotrópicos.

$$\{ \varepsilon_L^{33} \}_{\varphi\psi}^{hkl} = F_{ij}(\psi, \varphi, hkl) \langle \sigma_{ij}^L \rangle. \quad (3.22)$$

O fator de tensão depende da direção da medida e da família de planos  $\{hkl\}$ . Uma característica importante do fator de tensão é que ele não é um tensor, portanto não pode ser transformado para outro sistema de coordenadas. Além disso, ele é dependente da textura. Para materiais quasi-isotrópicos  $F_{ij}$  corresponde a uma combinação entre  $S_1$  e  $\frac{1}{2}S_2$ , por exemplo  $F_{11}(0, \psi, hkl)$  torna-se [5]:

textura  $\longrightarrow$  quasi-isotrópico

$$F_{11}(0, \psi, hkl) \longrightarrow S_1^{hkl} + \frac{1}{2}S_2^{hkl} \sin^2 \psi,$$

para uma melhor compreensão do uso do fator de tensão, sugere-se consultar a Hauk, 1997 [5] e Welzel & Mittemeijer, 2003 [63].

O contexto da presente seção, ou seja, materiais intrinsecamente anisotrópicos e com textura, exige considerar, além do fator de tensão  $F_{ij}$ , os chamados **modelos de interação de grão**. Estes refletem a forma que as tensões e deformações se distribuem no agregado policristalino. Os modelos de interação de grão aqui apresentados serão os de *Reuss*, *Voigt* e *Neerfeld-Hill*, como segue no próximo tópico.

## 3.5 Modelos de interação de grão

Para a aplicação prática de qualquer método de análise de tensões por difração de raios X é necessário conhecer as constantes elásticas de raios X (CEX) no caso de amostras macroscopicamente elasticamente isotrópicas. Os fatores de tensão de difração são necessários no caso de amostras macroscopicamente elasticamente anisotrópicas. Para determinar as CEX e os fatores de tensão aplica-se uma carga conhecida na amostra e simultaneamente mede-se a evolução da deformação por difração de raios X [4]. Em policristais, se faz necessário o uso de modelos de interação de grão para simplificar a análise de tensões. Estes modelos se referem a distribuição de tensões no agregado policristalino.

### 3.5.1 Modelo de Voigt

O modelo proposto por Voigt em 1910 [64] assume que a distribuição de deformações é homogênea na amostra, portanto, o tensor deformação é o mesmo para todos os cristalitos. A suposição de homogeneidade das deformações implica que todos os cristalitos são deformados de forma idêntica e isto garante a continuidade da deformação no contorno de grão, porém, este vínculo impõe que as tensões sejam diferentes em cristalitos com diferentes orientações já que as propriedades elásticas dos mesmos são distintas. No contorno de grão haverá, portanto, descontinuidade do tensor das tensões, ou seja, a condição de equilíbrio mecânico é violada. Desta forma, o modelo de Voigt é incompatível com o comportamento de policristais reais.

O fator de tensão no modelo de Voigt é calculado como segue [5]

$$F_{ij}(\psi, \varphi, hkl) = m_p^S \frac{\int_0^{2\pi} \langle c^S(hkl, \lambda, \varphi, \psi) \rangle_{ijpq}^{-1} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda}{\int_0^{2\pi} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda} m_q^S, \quad (3.23)$$

onde  $c^S$  é o tensor rigidez (*stiffness*) para o monocristal expressado no sistema de referência da amostra, na ausência de textura  $f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) = 1$  e racai-se na equação 3.19.

Para cristais com simetria cúbica as constantes  $S_1$  e  $\frac{1}{2}S_2$  podem ser calculadas das componentes do tensor compliança para o monocristal [4, 64]

$$S_1 = \frac{2s_0(s_{11} + 2s_{12}) + 5s_{12}s_{44}}{6s_0 + 5s_{44}}, \quad (3.24)$$

e

$$\frac{1}{2}S_2 = \frac{5(s_{11} - s_{12})s_{44}}{6s_0 + 5s_{44}}, \quad (3.25)$$

onde

$$s_0 = s_{11} - s_{12} - \frac{s_{44}}{2}. \quad (3.26)$$

Vale destacar que as CEX's não dependem de  $hkl$  no modelo de Voigt, portanto são iguais as constantes elásticas mecânicas [4].

### 3.5.2 Modelo de Reuss

O modelo proposto por Reuss em 1929 [65] assume que a distribuição de tensões é homogênea na amostra, portanto o tensor das tensões é o mesmo para todos os cristalitos. A suposição de homogeneidade das tensões implica que todos os cristalitos tem tensões idênticas e isto garante a continuidade da tensão no contorno de grão, porém este vínculo impõe que as deformações sejam diferentes em cristalitos com diferentes orientações, uma

vez que as propriedades elásticas dos mesmos são distintas. No contorno de grão haverá, portanto, descontinuidade do tensor de deformação. Desta forma, o modelo de Reuss é incompatível com o comportamento de policristais reais.

O fator de tensão no modelo de Reuss é calculado como segue [5]

$$F_{ij}(\psi, \varphi, hkl) = m_p^S \frac{\int_0^{2\pi} s^S(hkl, \lambda, \varphi, \psi)_{ijpq} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda}{\int_0^{2\pi} f^*(hkl, \lambda, \varphi, \psi) d\lambda} m_q^S, \quad (3.27)$$

onde  $s^S$  é o tensor de compliança (compliance) para o monocristal expressado no sistema de referência da amostra.

Para cristais com simetria cúbica as constantes  $S_1^{hkl}$  e  $\frac{1}{2}S_2^{hkl}$  podem ser calculadas das componentes do tensor de compliança para o monocristal [4]

$$S_1^{hkl} = s_{11} + s_0 \Gamma(hkl), \quad (3.28)$$

e

$$\frac{1}{2}S_2^{hkl} = s_{11} - s_{12} - 3s_0 \Gamma(hkl), \quad (3.29)$$

onde  $\Gamma$  é o fator de orientação [4]

$$\Gamma(hkl) = \frac{(h^2 k^2 + h^2 l^2 + k^2 l^2)}{h^2 + k^2 + l^2}$$

.

Observe que diferentemente do modelo de Voigt, no modelo de Reuss as CEX's dependem de  $hkl$ .

### 3.5.3 Modelo de Nurfeld-Hill

Os modelos de Voigt e Reuss são chamados de modelos extremos. Isso se deve ao fato de serem muito idealizados, pois nem a tensão nem a deformação são idênticas em todos os cristalitos. Em vista desta idealização extrema, os valores experimentais para as

constantes elásticas de amostras macroscopicamente elasticamente isotrópicas sempre está entre o valor obtido pelo modelo de Voigt e o valor obtido pelo modelo de Reuss [66]. Desta forma, no modelo de Neerfeld-Hill as constantes elásticas são calculadas tomando . Assim

$$E^{NH} = \frac{E^V + E^R}{2} \quad (3.30)$$

e

$$\nu^{NH} = \frac{\nu^V + \nu^R}{2}. \quad (3.31)$$

## Capítulo 4

# SIMETRIAS NO TENSOR ELASTICIDADE E CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS

O tensor de elasticidade pode ser usado para classificar os materiais de acordo com a simetria do material. Nas próximas seções são impostas condições sobre as componentes do tensor de elasticidade. Isto será feito fazendo que o tensor de elasticidade satisfaça certas simetrias.

### 4.1 Materiais triclínicos

O tensor das propriedades elásticas fornece o comportamento elástico em cada direção. Num material anisotrópico as cadeias elásticas elementares possuem uma estrutura não simétrica, o que de certo modo reflete a irregularidade dos grãos do material. Green definiu um material elástico como sendo aquele para o qual existe uma energia de deformação ( $\phi$ ) tal que :

$$\sigma_{11} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{11}}; \sigma_{12} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{12}}; \sigma_{33} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{33}}, \quad (4.1)$$

generalizando,

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}} = \Lambda_{ij11} \varepsilon_{11} + \Lambda_{ij12} \varepsilon_{12} + \dots \quad (4.2)$$

Tomando as equações abaixo:

$$\sigma_{11} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{11}} = \Lambda_{1111} \varepsilon_{11} + \Lambda_{1112} \varepsilon_{12} + \Lambda_{1113} \varepsilon_{13} + \Lambda_{1122} \varepsilon_{22} + \Lambda_{1123} \varepsilon_{23} + \Lambda_{1133} \varepsilon_{33}, \quad (4.3)$$

$$\sigma_{22} = \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{22}} = \Lambda_{2211} \varepsilon_{11} + \Lambda_{2212} \varepsilon_{12} + \Lambda_{2213} \varepsilon_{13} + \Lambda_{2222} \varepsilon_{22} + \Lambda_{2223} \varepsilon_{23} + \Lambda_{2233} \varepsilon_{33}, \quad (4.4)$$

e diferenciando 4.3 em relação a  $\varepsilon_{22}$  e 4.4 em relação a  $\varepsilon_{11}$ , tem-se,

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_{22}} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{11}} \right) = \Lambda_{1122}, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_{11}} \left( \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{22}} \right) = \Lambda_{2211}. \quad (4.6)$$

Mas, como a função energia  $\phi$  representa uma grandeza física, pode-se supor que esta função possua derivadas parciais contínuas, assim podemos igualar as derivadas mistas, como abaixo:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \varepsilon_{22} \partial \varepsilon_{11}} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varepsilon_{11} \partial \varepsilon_{22}}, \quad (4.7)$$

daí,

$$\Lambda_{1122} = \Lambda_{2211}, \quad (4.8)$$

avaliando outros termos,

$$\Lambda_{1133} = \Lambda_{3311}, \quad \Lambda_{2233} = \Lambda_{3322}, \quad \Lambda_{1112} = \Lambda_{1211}, \quad \Lambda_{1113} = \Lambda_{3111} \dots \quad (4.9)$$

Generalizando este resultado,

$$\Lambda_{ijkl} = \Lambda_{klij}. \quad (4.10)$$

Com esta consideração o número de constantes elásticas do material se reduz a 21, um material caracterizado por 21 constantes independentes é denominado **triclínico** e sua representação matricial é dada por:



$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1133} & \Lambda_{1112} & \Lambda_{1113} & \Lambda_{1123} \\ & \Lambda_{2222} & \Lambda_{2233} & \Lambda_{2212} & \Lambda_{2213} & \Lambda_{2223} \\ & & \Lambda_{3333} & \Lambda_{3312} & \Lambda_{3313} & \Lambda_{3323} \\ & & & \Lambda_{1212} & \Lambda_{1213} & \Lambda_{1223} \\ & \textit{Simetrico} & & & \Lambda_{1313} & \Lambda_{1323} \\ & & & & & \Lambda_{2323} \end{bmatrix}.$$

Na seção seguinte, é mostrada a matriz das propriedades elásticas para materiais **ortotrópicos**.

## 4.2 Materiais Ortotrópicos

Considerando o resultado da seção anterior, ou seja, o tensor elasticidade para materiais triclinicos, toma-se agora o caso de um material que possui três direções mutuamente ortogonais de simetria, dados por  $(x, y, z)$ , tomemos agora a reflexão do eixo  $z$  em relação ao plano  $xy$  (4.1):

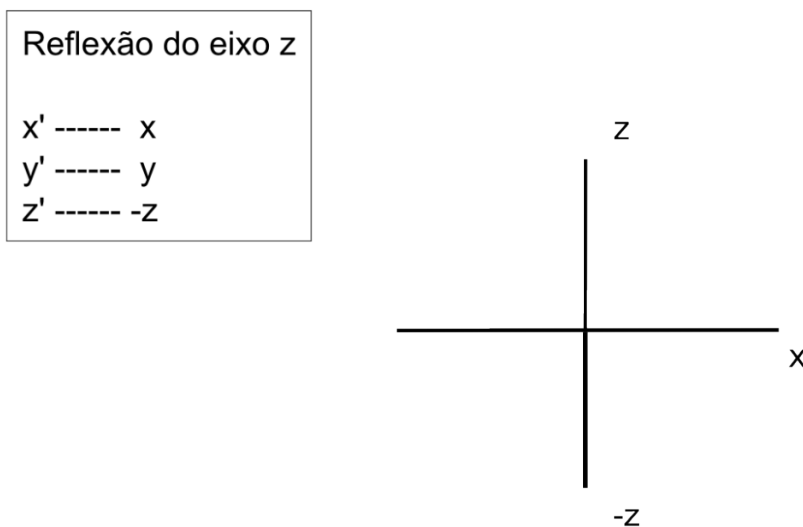


Figura 4.1: Reflexão ao longo do eixo  $z$ ,  $z' \longrightarrow -z$ .

A matriz que representa esta transformação será:

$$[Q] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Para um tensor de ordem 4 a lei de transformação será :

$$\Lambda'_{mnpq} = \Lambda_{ijkl} Q_{im} Q_{jn} Q_{kp} Q_{lq}. \quad (4.12)$$

Aplicando para o coeficiente  $\Lambda'_{1122}$ , tem-se:

$$\Lambda'_{1122} = \Lambda_{ijkl} Q_{i1} Q_{1n} Q_{2p} Q_{2q}. \quad (4.13)$$

Esta soma anula-se para  $i, j \neq 1$  e  $k, l \neq 2$ , daí  $\Lambda'_{1122} = \Lambda_{1122} \overbrace{Q_{11} Q_{11} Q_{22} Q_{22}}^1$ ,

$$\Lambda'_{1122} = \Lambda_{1122}. \quad (4.14)$$

Da mesma forma, tem-se para o coeficiente  $\Lambda'_{1123}$ :

$$\Lambda'_{1123} = \Lambda_{1123} \overbrace{Q_{11} Q_{11} Q_{22} Q_{33}}^{(-1)}, \quad (4.15)$$

$$\Lambda_{1123} = -\Lambda_{1123}. \quad (4.16)$$

Ou seja, sempre que o índice "3" aparecer um número ímpar de vezes o coeficiente será nulo, uma vez que os coeficientes devem ser mantidos garantindo a condição de isotropia.

Desta forma, tem-se

$$\Lambda_{1123} = \Lambda_{1311} = 0, \quad (4.17)$$

$$\Lambda_{2223} = \Lambda_{2213} = 0, \quad (4.18)$$

$$\Lambda_{3323} = \Lambda_{3313} = 0, \quad (4.19)$$

$$\Lambda_{2312} = \Lambda_{1312} = 0. \quad (4.20)$$

A nova matriz fica com 13 constantes independentes, tal tensor caracteriza materiais

classificados como **monoclínicos**

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1133} & \Lambda_{1112} & 0 & 0 \\ & \Lambda_{2222} & \Lambda_{2233} & \Lambda_{2212} & 0 & 0 \\ & & \Lambda_{3333} & \Lambda_{3312} & 0 & 0 \\ & & & \Lambda_{1212} & 0 & 0 \\ & \textit{Simetr} & & & \Lambda_{1313} & \Lambda_{1323} \\ & & & & & \Lambda_{2323} \end{bmatrix}.$$

Considerando a simetria com relação a  $x$  e  $z$ , e fazendo reflexões de  $x$  e  $z$  respectivamente, os elementos de matriz da transformação serão:

$$Q_{ij} = \widehat{e}_i \cdot [Q]e_j = \cos(e_i; e'_j). \quad (4.21)$$

Na equação 4.21,  $e_i$  e  $e'_j$  são os vetores de base para os sistemas original e transformado reespectivamente, de modo que a matriz de transformação fica como abaixo,

$$[Q] = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Fazendo um procedimento análogo ao anterior, com a lei de transformação:

$$\Lambda'_{mnpq} = \Lambda_{ijkl} Q_{im} Q_{jn} Q_{kp} Q_{lq}. \quad (4.23)$$

Para os termos  $\Lambda'_{1112}$ ,  $\Lambda'_{2212}$ , tem-se

$$\Lambda'_{1112} = \Lambda_{ijkl} Q_{i1} Q_{j1} Q_{k1} Q_{l2} = \Lambda_{1112} \overbrace{Q_{11} Q_{11} Q_{11} Q_{22}}^{-1} = -\Lambda_{1112}, \quad (4.24)$$

$$\Lambda'_{2212} = \Lambda_{ijkl} Q_{i2} Q_{j2} Q_{k1} Q_{l2} = \Lambda_{2212} \overbrace{Q_{22} Q_{22} Q_{11} Q_{22}}^{-1} = -\Lambda_{2212}, \quad (4.25)$$

assim, obrigatoriamente

$$\Lambda_{1112} = \Lambda_{2212} = 0. \quad (4.26)$$

Visto que a simetria não deve ser alterada, quando o índice "2" aparecer um número ímpar de vezes os termos se anularão perante a transformação 4.23. Por outro lado, fazendo o mesmo procedimento para os termos  $\Lambda_{3312}$  e  $\Lambda_{1323}$ :

$$\Lambda'_{3312} = \Lambda_{ijkl} Q_{i3} Q_{j3} Q_{k1} Q_{l2} = \Lambda_{3312} \overbrace{Q_{33} Q_{33} Q_{11} Q_{22}}^{-1} = -\Lambda_{3312}, \quad (4.27)$$

$$\Lambda'_{1323} = \Lambda_{ijkl} Q_{i1} Q_{j3} Q_{k2} Q_{l3} = \Lambda_{1112} \overbrace{Q_{11} Q_{33} Q_{22} Q_{33}}^{-1} = -\Lambda_{1112}, \quad (4.28)$$

com

$$\Lambda_{3312} = \Lambda_{1323} = 0. \quad (4.29)$$

Neste caso, quando o índice "3" aparecer um número ímpar de vezes na lei de transformação 4.23 o coeficiente obrigatoriamente será nulo. Portanto, o tensor elasticidade para um material com simetria em três direções ortogonais entre si, tem 4 constantes independentes a menos que o tensor elasticidade para um material monoclinico, deste modo a nova matriz será:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_{1111} & \Lambda_{1122} & \Lambda_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ & \Lambda_{2222} & \Lambda_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ & & \Lambda_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ & & & \Lambda_{1212} & 0 & 0 \\ & \textit{Simetr} & & & \Lambda_{1313} & 0 \\ & & & & & \Lambda_{2323} \end{bmatrix}$$

Esta matriz possui 9 constantes independentes e caracteriza materiais chamados de **ortotrópicos**.

Este último resultado será utilizado intensivamente no decorrer deste trabalho, uma vez que, leva-se em consideração os materiais classificados como ortotrópicos.

## Capítulo 5

# EQUAÇÕES PARA ANÁLISE DE TENSÕES RESIDUAIS EM MATERIAIS ORTOTRÓPICOS

### 5.1 Introdução

Um material que possui textura e anisotropia intrínseca dos cristalitos é também elasticamente macroscopicamente anisotrópico. A textura gera anisotropia à medida que certas direções são privilegiadas. De fato, em filmes finos policristalinos os cristalitos geralmente apresentam orientação preferencial na direção de crescimento. Já nas camadas do filme fino não ocorre direção preferencial e os grãos se orientam aleatoriamente. Isto caracteriza materiais transversalmente isotrópicos (apresenta ortotropia do eixo de crescimento do filme com relação as camadas do mesmo; no plano das camadas o material é isotrópico). As relações tensão-deformação para materiais ortotrópicos são descritas pela lei de Hooke utilizando o tensor de rigidez que é descrito pela Equação 5.4 apresentada a seguir na Seção 5.2 e pelas transformações dos tensores do sistema de coordenadas da amostra (S) para o sistema do laboratório (L) (Equação 3.18). A seguir, as equações para a deformação medida por raios X  $\{\varepsilon^L\}_{\varphi\psi}^{hkl}$  serão expressas em função dos estados de tensão principais biaxial e triaxial reespectivamente.

## 5.2 Relações tensão-deformação no sistema de coordenadas principal da amostra

Em uma linguagem fenomenológica, pode-se definir os materiais ortotrópicos como sendo caracterizados por: três módulos longitudinais de elasticidade ou modulo de Young ( $E_{11}$ ,  $E_{22}$ ,  $E_{33}$ ), que descrevem a tendência do corpo deformável sofrer alongamento num eixo; três módulos de elasticidade transversais ( $G_{12}$ ,  $G_{23}$ ,  $G_{13}$ ), que descrevem a tendência do corpo deformável sofrer cisalhamento; três coeficientes de Poisson ( $\nu_{12}$ ,  $\nu_{23}$ ,  $\nu_{13}$ ), que descrevem a tendência do corpo deformável sofrer contração transversalmente a direção de alongamento, ou seja as direções ortogonais a direção da aplicação da tensão sofrem deformação.

O coeficiente de Poisson é um tensor representado como abaixo

$$\nu_{ij} = -\frac{\varepsilon_{jj}}{\varepsilon_{ii}} \quad \forall \quad i \neq j, \quad (5.1)$$

onde  $j$  representa a direção transversal e  $i$  a direção longitudinal e o sinal negativo indica que se o corpo sofre tração então seu comprimento irá aumentar enquanto as dimensões da área de seção transversal irão diminuir, o oposto ocorre na compressão. As constantes elásticas (que são as componentes do tensor de elasticidade) são obtidas empiricamente. Para tanto faz-se um ensaio em cada direção aplicando uma tensão uniaxial; o material é carregado na direção  $x$  e a deformação é então medida. O mesmo procedimento é feito para as direções  $y$  e  $z$ . Conhecidas a tensão e a deformação em cada direção, calcula-se o módulo de Young ( $E$ ). Para relacionar o módulo de cisalhamento ( $G$ ) ao módulo de Young ( $E$ ) e ao coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) faz-se um ensaio aplicando uma tensão cisalhante à amostra, eis que tal relação é descrita pela equação abaixo

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (5.2)$$

A relação inversa da lei de Hooke é fornecida aplicando a inversa do tensor elasticidade

$\Lambda^{-1}$  em ambos os lados

$$\varepsilon_{kl} = \Lambda_{klij}^{-1} \sigma_{ij}. \quad (5.3)$$

A forma matricial da equação 5.3 para materiais ortotrópicos pode ser dada por [6]:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_{11}} & -\frac{\nu_{21}}{E_{22}} & -\frac{\nu_{31}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} & \frac{1}{E_{22}} & -\frac{\nu_{32}}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{E_{11}} & -\frac{\nu_{23}}{E_{22}} & \frac{1}{E_{33}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \tau_{23} \\ \tau_{13} \\ \tau_{12} \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

na equação 5.4 a primeira matriz a direita é a representação do tensor de rigidez (*compliance*). Como esta matriz é simétrica, tem-se

$$\frac{\nu_{21}}{E_{22}} = \frac{\nu_{12}}{E_{11}},$$

$$\frac{\nu_{31}}{E_{33}} = \frac{\nu_{13}}{E_{11}}, \quad (5.5)$$

$$\frac{\nu_{32}}{E_{33}} = \frac{\nu_{23}}{E_{22}}.$$

A seguir, são mostradas as equações para o estado triaxial de tensões no sistema de coordenadas principal da amostra.

### Estado de tensão principal triaxial

O estado de tensão principal triaxial ocorre quando o tensor das tensões esta representado no sistema de principal de referência da amostra (P), neste caso, as tensões cisalhantes são nulas, portanto, somente  $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$  são não nulas. De acordo com a equação 5.4, tem-se

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_{11} \rangle^S &= \frac{1}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{21}}{E_{22}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{31}}{E_{33}} \sigma_{33}, \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle^S &= -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} \sigma_{11} + \frac{1}{E_{22}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{32}}{E_{33}} \sigma_{33}, \\ \langle \varepsilon_{33} \rangle^S &= -\frac{\nu_{13}}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{23}}{E_{22}} \sigma_{22} + \frac{1}{E_{33}} \sigma_{33},\end{aligned}\tag{5.6}$$

substituindo 5.6 na equação 3.18

$$\begin{aligned}\{\varepsilon_{33}^L\}_{\varphi\psi}^{hkl} &= \\ &= \sin^2 \psi \cos^2 \varphi \left[ \frac{1}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{21}}{E_{22}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{31}}{E_{33}} \sigma_{33} \right] \\ &+ \sin^2 \psi \sin^2 \varphi \left[ -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} \sigma_{11} + \frac{1}{E_{22}} \sigma_{22} - \frac{\nu_{32}}{E_{33}} \sigma_{33} \right] \\ &+ \cos^2 \psi \left[ -\frac{\nu_{13}}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{23}}{E_{22}} \sigma_{22} + \frac{1}{E_{33}} \sigma_{33} \right].\end{aligned}\tag{5.7}$$



utilizando a relação  $\cos^2 \psi = 1 - \sin^2 \psi$  e rearranjando os termos tem-se

$$\begin{aligned} \{\varepsilon_{33}^L\}_{\varphi\psi}^{hkl} = & \\ & \sin^2 \psi \left\{ \frac{\sigma_{11}}{E_{11}} [(1 + \nu_{12}) \cos^2 \varphi + (\nu_{13} - \nu_{12})] \right. \\ & + \frac{\sigma_{22}}{E_{22}} [(1 + \nu_{21}) \sin^2 \varphi + (\nu_{23} - \nu_{21})] \\ & \left. - \frac{\sigma_{33}}{E_{33}} (1 + \nu_{32} \sin^2 \varphi + \nu_{31} \cos^2 \varphi) \right\} \\ & - \left( \frac{\nu_{13}}{E_{11}} \sigma_{11} + \frac{\nu_{23}}{E_{22}} \sigma_{22} - \frac{1}{E_{33}} \sigma_{33} \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

A Equação 5.8 descreve a deformação medida por difração de raios X em função do estado de tensão principal triaxial  $(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33})$  dos módulos de Young  $(E_{11}, E_{22}, E_{33})$  e dos coeficientes de Poisson  $(\nu_{12}, \nu_{23}, \nu_{13})$ .

### Estado de tensão principal biaxial

No caso do estado de tensão principal biaxial as tensões fora do plano (adotamos aqui o plano  $xy$ ) são nulas ( $\sigma_{33} = 0$ ). Isto é interessante no caso da análise de raios X de superfícies, filmes finos e revestimentos [4]. As relações tensão-deformação ficam como abaixo

$$\langle \varepsilon_{11} \rangle^S = \frac{1}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{21}}{E_{22}} \sigma_{22},$$

$$\langle \varepsilon_{22} \rangle^S = -\frac{\nu_{12}}{E_{11}} \sigma_{11} + \frac{1}{E_{22}} \sigma_{22}, \quad (5.9)$$

$$\langle \varepsilon_{33} \rangle^S = -\frac{\nu_{13}}{E_{11}} \sigma_{11} - \frac{\nu_{23}}{E_{22}} \sigma_{22},$$

substituindo as equações 5.9 na equação 3.18, obtêm-se

$$\begin{aligned} \{ \varepsilon_{33}^L \}_{\varphi\psi}^{hkl} = & \\ & \sin^2 \psi \left\{ \frac{\sigma_{11}}{E_{11}} \left[ (1 + \nu_{12}) \cos^2 \varphi + (\nu_{13} - \nu_{12}) \right] \right. \\ & \left. + \frac{\sigma_{22}}{E_{22}} \left[ (1 + \nu_{21}) \sin^2 \varphi + (\nu_{23} - \nu_{21}) \right] \right\} \\ & - \left( \frac{\nu_{13}}{E_{11}} \sigma_{11} + \frac{\nu_{23}}{E_{22}} \sigma_{22} \right). \end{aligned} \quad (5.10)$$

A Equação 5.10 relaciona a deformação com a tensão superficial em materiais ortotrópicos, com base no sistema de referência principal da amostra (P). No próximo capítulo a consistência destas equações será testada utilizando as constantes elásticas presentes no trabalhos de D. Faurie *et al* [1].

### 5.3 Equação proposta para o coeficiente de Poisson $\nu_{13}$

As curvas  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  são lineares no caso de materiais intrinsecamente isotrópicos e macroscopicamente isotrópicos na ausência de textura. Para materiais intrinsecamente anisotrópicos, a presença de tensões cisalhantes e/ou textura torna as curvas  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  não lineares. No caso específico de filmes finos, utiliza-se geralmente a equação para o estado principal biaxial de tensão (Equações 3.19 e 3.20) para analisar as tensões

superficiais. Mesmo no caso intrinsecamente isotrópico na ausência de textura, pode-se obter curvas  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$  não lineares. Isto se deve ao fato de que filmes finos possuem os grãos dispostos em estrutura colunar, ou seja, morfologicamente falando “textura morfológica”; os grãos no plano  $S_1S_2$  estão dispostos diferentemente dos grãos nos planos  $S_1S_3$  e  $S_2S_3$ .

No que segue, usa-se a Equação 5.10 no âmbito de se obter uma expressão para o coeficiente de Poisson fora do plano  $S_1S_2$  para filmes finos transversalmente isotrópicos. Filmes finos que possuem isotropia transversal, como o próprio nome sugere, são isotrópicos no plano  $S_1S_2$ , a equação 5.10, portanto independe de  $\varphi$ . Além disso,  $E_{11} = E_{22} = E$ ;  $\nu_{12} = \nu_{21} = \nu$  e  $\nu_{13} = \nu_{23}$  são as condições de isotropia no plano  $S_1S_2$ . Logo podemos então proceder da seguinte maneira.

A Equação 5.10 para  $\varphi = 0$ ;  $E_{11} = E_{22} = E$ ;  $\nu_{12} = \nu_{21} = \nu$  e  $\nu_{13} = \nu_{23}$  torna-se

$$\{\varepsilon_{33}^L\}_{0\psi}^{hkl} = \sin^2 \psi \left[ \frac{\sigma_{11}}{E} (1 + \nu_{13}) + \frac{\sigma_{22}}{E} (\nu_{13} - \nu) \right] - \frac{\nu_{13}}{E} [\sigma_{11} + \sigma_{22}\nu] \quad (5.11)$$

Se o material em questão fosse isotrópico, a equação acima seria uma reta, porém, com a isotropia transversal (no plano  $S_1S_2$ , aparece o termo  $\nu_{13}$ , que corresponde ao coeficiente de Poisson fora do plano (perpendicular a  $S_1S_2$ ). Portanto, atribui-se a não linearidade da Equação 5.11 à variação do coeficiente de Poisson  $\nu_{13}$  com  $\psi$ .

Neste trabalho a influência do tamanho de grão nas propriedades elásticas do material não foi levada em consideração [1, 67], sendo assim, pode-se dizer que o coeficiente de Poisson fora do plano  $\nu_{13}$  pode ser considerado como função de  $\psi$  e  $hkl$ ;

$$\nu_{13} \longrightarrow \nu_{13}^{\psi, hkl}, \quad (5.12)$$

isolando  $\nu_{13}$  na Equação 5.11, tem-se

$$\nu_{13}^{\psi, hkl} = \frac{\{\varepsilon_{33}^L\}_{0\psi}^{hkl} E - \sin^2 \psi (\sigma_{11} - \sigma_{22}\nu)}{(\sigma_{11} + \sigma_{22}) (\sin^2 \psi - 1)}. \quad (5.13)$$

A Equação 5.13 representa  $\nu_{13}$  como função de  $\psi$  e  $hkl$ , já que  $\{\varepsilon_{33}^L\}_{0\psi}^{hkl}$  também possui essa dependência. As constantes  $E$  e  $\nu$ , são reespectivamente, o módulo de Young e o

coeficiente de Poisson no plano  $S_1S_2$ . Observe que esta equação diverge quando  $\sin \psi = 1$  ou seja,  $\psi = \frac{\pi}{2}$ , isso está de acordo com a impossibilidade de medição de difração nesse ângulo.

**Expressão para  $\nu_{13}$  em função das tensões residuais em filmes finos** Filmes finos geralmente apresentam tensões residuais, isso acontece quer seja devido as condições experimentais de deposição do filme ou por questões relacionadas às diferenças das propriedades do substrato e do filme fino em si. De fato, consideremos a equação 5.13, nela as tensões  $\sigma_{11}$  e  $\sigma_{22}$  não são as tensões aplicadas à amostra, deve-se atentar para o fato de que as tensões aplicadas a amostra somam-se às tensões internas do material, portanto,  $\sigma_{11}$  e  $\sigma_{22}$  são na realidade tensões resultantes da superposição das tensões aplicadas  $\sigma_{11}^A$ ,  $\sigma_{22}^A$  e das tensões residuais  $\sigma_{11}^r$  e  $\sigma_{22}^r$ . Assim, tem-se

$$\sigma_{11} = \sigma_{11}^A + \sigma_{11}^r, \quad (5.14)$$

$$\sigma_{22} = \sigma_{22}^A + \sigma_{22}^r, \quad (5.15)$$

Substituindo estas duas últimas equações na Equação 5.13, tem-se

$$\nu_{13}^\psi = \frac{\{\varepsilon_{33}^L\}_{0\psi}^{hkl} E - \sin^2 \psi (\sigma_{11}^r - \sigma_{22}^r \nu + \sigma_{11}^A - \sigma_{22}^A \nu)}{(\sigma_{11}^r + \sigma_{22}^r + \sigma_{11}^A + \sigma_{22}^A) (\sin^2 \psi - 1)}. \quad (5.16)$$

Esta é a equação obtida para a análise tanto das tensões como do coeficiente de Poisson fora do plano ( $\nu_{13}$ ). Numa superfície/filme fino livre de tensões, sujeita ao estado de tensão principal biaxial. As tensões *aparentes*  $\sigma_{11}$  e  $\sigma_{22}$  são iguais as tensões aplicadas  $\sigma_{11}^A$  e  $\sigma_{22}^A$  reespectivamente.

A Equação 5.16 descreve a evolução do coeficiente de Poisson para materiais transversalmente isotrópicos, seu valor médio  $\langle \nu_{13} \rangle$  pode ser calculado utilizando a função de distribuição de orientações (FDO). Para este fim, propõe-se a equação descrita abaixo

para a média mecânica do coeficiente de Poisson fora do plano  $\nu_{13}$  :

$$\langle \nu_{13} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \iiint_G \nu_{13}(\vec{g}) f(\vec{g}) d^3g = \quad (5.17)$$

$$\langle \nu_{13} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_{\gamma=0}^{2\pi} \int_{\beta=0}^{\pi} \int_{\alpha=0}^{2\pi} \nu_{13}(\alpha, \beta, \gamma) f(\alpha, \beta, \gamma) \sin(\beta) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (5.18)$$

observe que, de acordo com a equação 3.6, a integração é feita sobre todo espaço de orientações  $G$ .

## Capítulo 6

# RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 6.1 Introdução

As equações presentes na literatura (3.22) para análise de tensões por difração de raios X em materiais anisotrópicos geralmente levam em consideração o fator de tensão, que por sua vez conecta/relaciona as tensões às deformações. Como comentado anteriormente na Subseção 3.4.5, o fator de tensão não é um tensor, portanto não é possível transformá-lo de um sistema de coordenadas a outro. Em via contrária, as equações propostas neste trabalho para os estados principais biaxial e triaxial de tensão utilizam um tensor que conecta as deformações às tensões no sistema principal da amostra. Devido as simetrias de ortotropia impostas a este tensor, o uso do fator de tensão é substituído pelo tensor de elasticidade ortotrópico.

### 6.2 Cálculo de $\nu_{13}$ médio para um filme fino de Au

Filmes finos geralmente apresentam anisotropia, sendo que esta pode ser gerada pelas condições experimentais de deposição ou pela diferença entre as propriedades mecânicas do substrato e do filme fino. A fim de especular se a Equação 5.13 gera resultados razoáveis para  $\nu_{13}$ , um estudo de caso foi realizado utilizando os resultados experimentais

Tabela 6.1: Cargas aplicadas e tensões aplicadas resultantes (aparentes) para o filme de ouro com textura de fibra  $\{111\}$  [1].

Tensão	$T_0$	$T_1$	$T_2$	$T_3$	$T_4$	$T_5$
Carga (N)	0	1,1	2,2	3,6	5,6	6,6
$\sigma_{11}$ (Mpa)	0	28	56	91,8	143	168
$\sigma_{22}$ (Mpa)	0	6,3	12,5	20,5	31,9	37,6

Tabela 6.2: Valores de  $\psi$  e  $\sin^2 \psi$  para diferentes planos ( $hkl$ ) para o filme fino de ouro com textura de fibra  $\{111\}$  [1].

Plano difratado	(222)	(331)	(311)	(420)	(33 $\bar{3}$ )	(400)	(31 $\bar{1}$ )	(22 $\bar{2}$ )	(4 $\bar{2}$ 0)
Ângulo $\psi$	0	22,00	29,50	39,23	48,53	54,74	58,52	70,53	75,04
$\sin^2 \psi$	0	0.14	0.24	0.40	0.56	0.67	0.73	0.89	0.93

de D. Faurie *et al* [1]. O trabalho de D. Faurie examina os efeitos da textura cristalográfica nas propriedades elásticas de filmes finos, portanto duas amostras são estudadas: um filme fino não texturado de ouro macroscopicamente elasticamente isotrópico; e um filme fino de ouro apresentando textura de fibra  $\{111\}$  macroscopicamente elasticamente anisotrópico, mais especificamente, o filme texturado é transversalmente isotrópico (isotrópico no plano  $S_1S_2$ ). Ambas amostras consistindo de substrato+filme fino com a geometria da figura 6.1 foram carregadas com 5 cargas distintas  $T_0, T_1, T_2, T_3, T_4$  (ver tabela 6.1) e a evolução da deformação foi medida via difração de raios X para cada ângulo  $\psi$  da tabela 6.2.

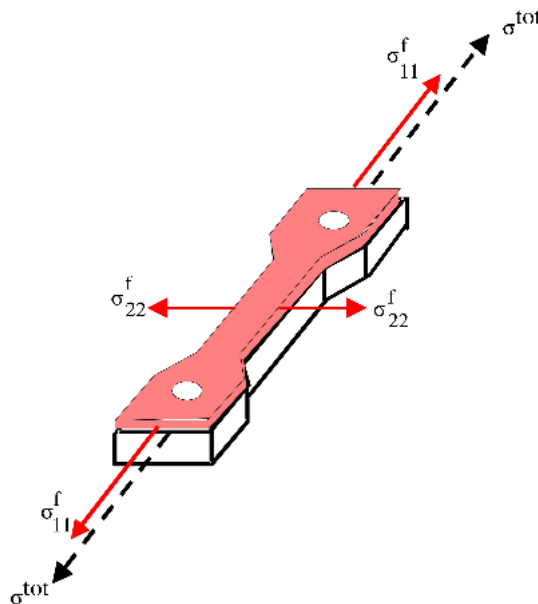


Figura 6.1: Amostra sujeita a tensão  $\sigma_{11}^{tot}$ , a tensão transversal  $\sigma_{22}^f$  surge no filme devido a diferença entre os coeficientes de Poisson no plano  $S_1S_2$  entre o substrato e o filme; a geometria da amostra também é mostrada [1].

Os resultados experimentais de D.Faurie *et al* para o filme texturado são apresentados no Figura 6.2 de  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$ . Repare que o comportamento da curva não é linear.

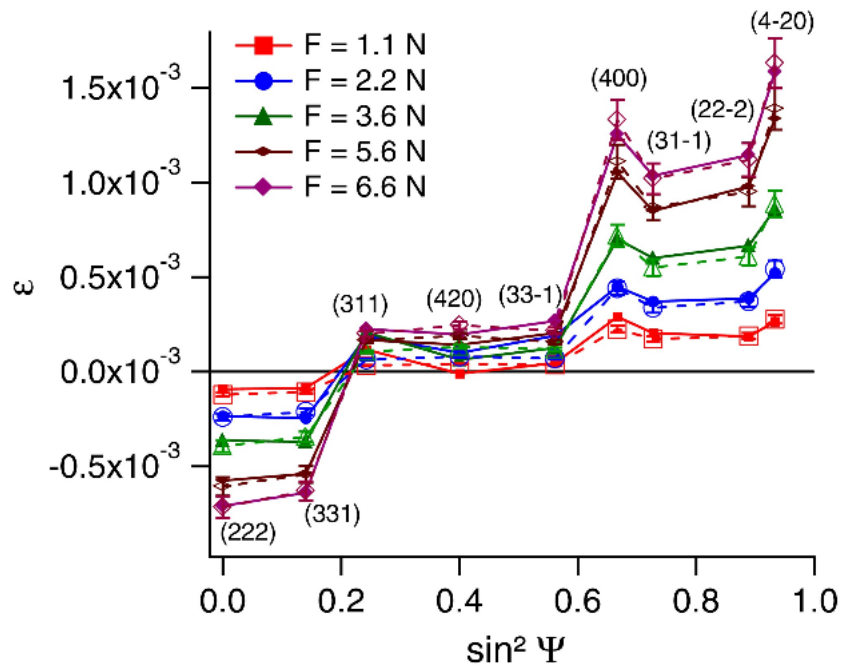


Figura 6.2: Deformações em função de  $\sin^2 \psi$ ; curvas experimentais (linhas e símbolos cheios) e teóricas (linhas pontilhadas e símbolos abertos). ref. [1]

Com os dados obtidos da Figura 6.2, fez-se um ajuste pelo método dos mínimos quadrados, como mostra a figura 6.3. O coeficiente angular obtido para o ajuste foi igual a  $2,02885 \cdot 10^{-3}$ , o coeficiente linear igual a  $-0,609537 \cdot 10^{-3}$  e o coeficiente de correlação  $R^2 = 0,910672$ . Logo a função encontrada por este ajuste foi

$$\varepsilon = 2,02885 \cdot 10^{-3} \sin^2 \psi - 0,609537 \cdot 10^{-3}, \quad (6.1)$$



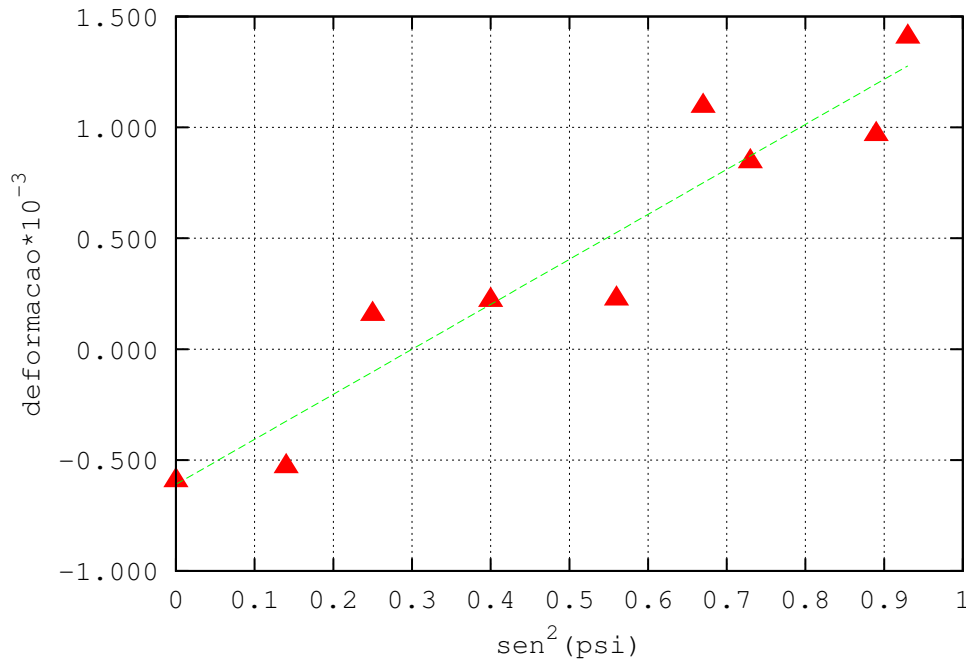


Figura 6.3: Dados experimentais para a curva do trabalho de D. Faurie *et al* para a curva com tensão resultante  $T_4$ , a reta foi obtida por um ajuste linear, note que devido a anisotropia do material a curva real não é linear. ref. [1]

Por outro lado, o coeficiente angular da equação 5.11 para a tensão  $T_4$  ( $\sigma_{11} = 143MPa$  e  $\sigma_{22} = 31,9MPa$ ) da tabela 6.1 e com  $E = 91,8GPa$  e  $\nu = 0,566$  torna-se;

$$m = 1,36105228 \cdot 10^{-3} + 1,9005228758 \cdot 10^{-3}\nu_{13}, \quad (6.2)$$

onde o módulo de Young  $E$  e o coeficiente de Poisson  $\nu$  foram obtidos no trabalho de D. Faurie *et al* por meio do modelo de interação grão de Neerfeld-Hill, já que, as constantes elásticas foram calculadas com sendo iguais a  $s_{11} = 23 \pm 2TPa^{-1}$ ,  $s_{12} = -11,0 \pm 0,9TPa^{-1}$  e  $s_{44} = 24 \pm 2TPa^{-1}$ .

Comparando as equações 6.1 e 6.2, obtemos  $\nu_{13}^m = 0,351$ , onde o sobrescrito ' $m$ ' indica que trata-se de um valor médio.

Em um trabalho anterior, Santos *et al* (2010) [6] encontrou um valor de  $\nu_{13}^{Santos} = 0,311$  para o filme fino de ouro texturado também utilizando o método dos mínimos quadrados.

A razão entre o valor calculado por Santos *et al* e o valor acima calculado é dada abaixo

$$\frac{\nu_{13}^m}{\nu_{13}^{Santos}} \approx 0.89. \quad (6.3)$$

Ou seja, uma diferença de aproximadamente 11%. Levando-se em consideração a incerteza desse valor, o resultado encontrado para  $\nu_{13}^m = 0,351$  neste trabalho está de acordo com o resultado de Santos *et al*. As incertezas envolvidas nos cálculos é objeto de um estudo posterior.

### **Coefficiente de Poisson 5.13 calculado através da superfície gerada**

Através dos dados da Tabela 6.1 ( $\sigma_{11} = 143MPa, \sigma_{22} = 31,9MPa$ ) e dos valores encontrados para  $E (= 91,8GPa)$  e  $\nu (= 0,566)$  chega-se a seguinte expressão para  $\nu_{13}^{\psi, hkl}$

$$\nu_{13}^{\psi, hkl} = \frac{(91,8) \cdot 10^3 \{\varepsilon_{13}^L\}_{0\psi}^{hkl} - 124,9446 \sin^2 \psi}{174,9 \cdot (\sin^2 \psi - 1)}. \quad (6.4)$$

Pôde-se então plotar a superfície 6.4 utilizando os dados do Figura 6.2 de  $\varepsilon$  versus  $\sin^2 \psi$ . De maneira que o valor médio de  $\nu_{13}^{\psi, hkl}$  na superfície foi calculado e obteve-se  $\nu_{13}^{ms} = 0,225$ . Onde o sobrescrito '*ms*' indica o valor médio na superfície 6.4.

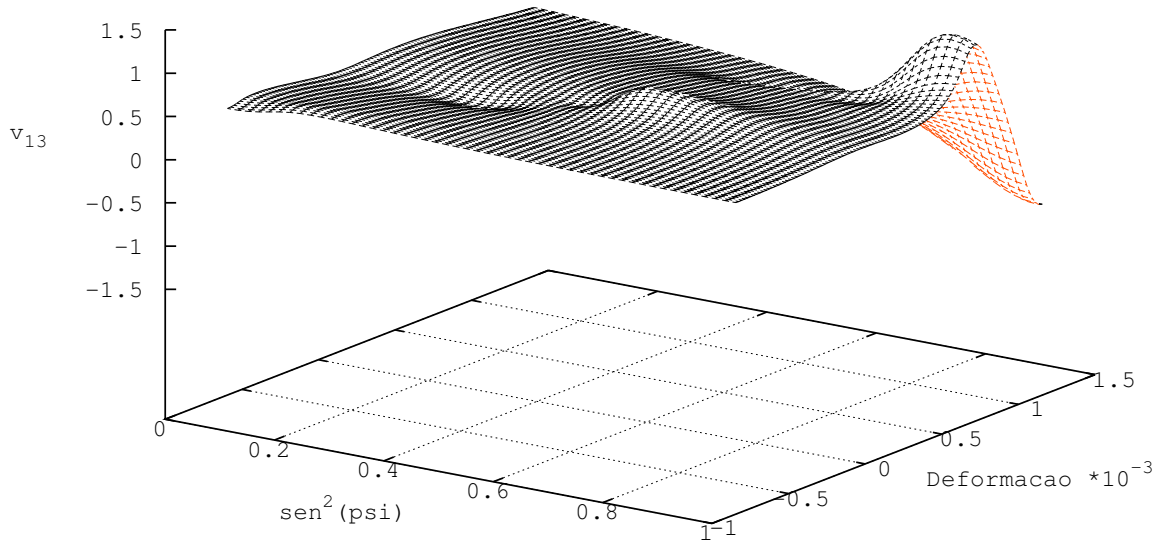


Figura 6.4: Superfície gerada através da equação 6.4, observe o pico gerado quando  $\sin^2 \psi \rightarrow 1$  ou seja  $\psi \rightarrow \frac{\pi}{2}$ . A equação 6.4 diverge nesse ponto.

A razão entre o valores dos coeficientes de Poisson  $\nu_{13}^{ms} = 0,225$  e  $\nu_{13}^m$  é

$$\frac{\nu_{13}^{ms}}{\nu_{13}^m} \approx 0,64, \quad (6.5)$$

e a razão entre  $\nu_{13}^{ms} = 0,225$  e o valor de Santos *et al*  $\nu_{13} = 0,311$  é dada por:

$$\frac{\nu_{13}^{ms}}{\nu_{13}} \approx 0,72. \quad (6.6)$$

O valor medido na superfície foi  $\approx 46\%$  menor do que o valor obtido pelo método dos mínimos quadrados, tratando-se, portanto de um resultado significativamente menor. Além disso, o valor medido na superfície foi  $\approx 28\%$  menor do que o valor obtido por Santos *et al*. Vale destacar, que em alguns trechos da superfície, os valor de  $\nu_{13}^{ms}$  está de acordo com o resultado obtido por Santos *et al* [6].

## Capítulo 7

# CONCLUSÃO

Uma nova equação foi proposta para o coeficiente de Poisson  $\nu_{13}$  para filmes finos. Atribui-se à  $\nu_{13}$  o papel de fator anisotrópico na lei de  $\sin^2 \psi$  modificada (Eq.5.11), a superfície para este fator anisotrópico foi plotada para dados experimentais obtidos do trabalho de D.Faurie *et al*, esta superfície se mostrou bem comportada para pontos suficientemente distantes de  $\psi = \frac{\pi}{2}$ . O estudo de caso para o filme finos texturado de ouro, no qual se calculou o valor médio de  $\{\nu_{13}^L\}^{\psi, hkl}$  de duas formas diferentes (método dos mínimos quadrados e pela superfície média), revelou-se de acordo com o trabalho de Santos *et al* quando calculado pelo método dos mínimos quadrados. No caso da superfície (figura 6.4), somente algumas regiões da mesma apresentaram  $\nu_{13}$  próximo do valor calculado por Santos. Como a superfície (figura 6.4) apresenta uma indeterminação quando  $\psi = \frac{\pi}{2}$ , os valores de  $\{\nu_{13}^L\}^{\psi, hkl}$  oscilam muito nas proximidades deste ponto, sugere-se realizar medidas de difração raios X onde  $\psi$  esteja razoavelmente distante de  $\frac{\pi}{2}$ , uma vez que não se sabe se isso pode influenciar significativamente os valores médios obtidos de deformação por difração de raios x. Do ponto de vista teórico, uma nova equação foi obtida em função dos parâmetros experimentais, porém, existe a necessidade de se verificar experimentalmente os resultados obtidos para o coeficiente de Poisson fora do plano, uma vez que, o trabalho de Santos *et al* que foi utilizado a título de comparação é teórico.

# Apêndice

## Termodinâmica da Deformação

Suponha uma mudança infinitesimal  $\delta u_i$  no vetor de deslocamentos  $u_i$ :

$$u_i \longrightarrow u_i + \delta u_i \quad (1)$$

Sabe-se que a  $i$ -ésima componente da força interna por unidade de volume é dada por

$$f_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \quad (2)$$

Considere o trabalho  $\delta w$  devido a este deslocamento infinitesimal, mais especificamente, o trabalho devido as forças internas que surgem no sólido. Seja o trabalho dado pela equação

$$\delta w = f_i \delta u_i \Rightarrow \int \delta w dV = \int f_i \delta u_i dV, \quad (3)$$

usando 2,

$$\int \delta w dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i dV, \quad (4)$$

integrando por partes,

$$\int \delta w dV = \oint \sigma_{ik} \delta u_i dA_k - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV. \quad (5)$$

Tomando uma superfície no infinito, ou seja, um sólido que foi deformado longe de sua

superfície de modo que a deformação na superfície seja nula, tem-se

$$\int \delta w dV = \overbrace{\int \sigma_{ik} \delta u_i dA_k}^0 - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV, \quad (6)$$

daí,

$$\int \delta w dV = - \int \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dV = - \int \sigma_{ik} \delta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) dV, \quad (7)$$

lembrando que  $\frac{\partial u_i}{\partial x_k}$  é um tensor simétrico,

$$\int \delta w dV = - \frac{1}{2} \int \sigma_{ik} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dV, \quad (8)$$

mas,  $\varepsilon_{ij} = \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ ;

$$\int \delta w dV = - \int \sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik} dV, \quad (9)$$

ou equivalentemente,

$$\delta w = -\sigma_{ik} \delta \varepsilon_{ik}, \quad (10)$$

da primeira lei da termodinâmica,

$$dE = \delta Q - \delta W, \quad (11)$$

$$dE = T ds + \sigma_{ik} d\varepsilon_{ik}, \quad (12)$$

esta é a relação termodinâmica fundamental para corpos deformados.

No caso *hidrostático*, quando age uma pressão  $p$ , tem-se

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik}, \quad (13)$$

onde  $\delta_{ik}$  é a delta de Kronecker e vale 1 quando  $i = j$  e 0 sempre que  $i \neq j$ , substituindo na Equação 12;

$$dE = T ds - p \delta_{ik} d\varepsilon_{ik} = T ds - p d\varepsilon_{ii} = T ds - p(d\varepsilon_{xx} + d\varepsilon_{yy} + d\varepsilon_{zz}), \quad (14)$$

mas,  $d\varepsilon_{xx} + d\varepsilon_{yy} + d\varepsilon_{zz} = dV$ , a equação 12 toma a forma termodinâmica habitual.

Realizando uma transformação de Legendre, introduzimos o potencial termodinâmico denominado energia livre de Helmmoltz, a saber:

$$F = E - Ts, \quad (15)$$

diferenciando,

$$dF = dE - Tds - sdT, \quad (16)$$

substituindo 12,

$$dF = -sdT + \sigma_{ik}d\varepsilon_{ik}, \quad (17)$$

definindo o potencial termodinâmico arbitrário  $\phi$  como

$$\phi = E - TS - \sigma_{ik}\varepsilon_{ik}, \quad (18)$$

diferenciando,

$$d\phi = dE - TdS - SdT - \sigma_{ik}d\varepsilon_{ik} - \varepsilon_{ik}d\sigma_{ik}, \quad (19)$$

substituindo 17 na ultima equação

$$d\phi = -sdT - \varepsilon_{ik}d\sigma_{ik}. \quad (20)$$

O termo  $\varepsilon_{ik}d\sigma_{ik}$  tem dimensão de energia por unidade de volume. Para o caso do potencial termodinâmico energia livre de Gibbs, a transformada de Legendre se dá como

$$\phi = E - TS + PV. \quad (21)$$

Analisando quais são as variáveis independentes nas Equações 12 e 17: em  $dE = Tds + \sigma_{ik}d\varepsilon_{ik}$  as variáveis independentes são  $s$  e  $\varepsilon_{ik}$ . Já em  $dF = -sdT + \sigma_{ik}d\varepsilon_{ik}$  as variáveis independentes são  $T$  e  $\varepsilon_{ik}$ . É bem comum tomar o elemento diferencial de  $dE$  e  $dF$  e comparar os termos com as equações termodinâmicas acima para  $dE$  e  $dF$ :

$$dE = \left( \frac{\partial E}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{ik}} ds + \left( \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_s d\varepsilon_{ik} = Tds + \sigma_{ik}d\varepsilon_{ik}, \quad (22)$$

e

$$dF = \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ik}} dT + \left( \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T = -s dT + \sigma_{ik} d\varepsilon_{ik}, \quad (23)$$

daí, obtêm-se

$$\sigma_{ik} = \left( \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_s = \left( \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T, \quad (24)$$

ou ainda, em termos do potencial termodinâmico  $\phi$ , para isso basta tomar a diferencial de  $\phi$  de forma análoga ao que foi feito acima

$$\varepsilon_{ik} = - \left( \frac{\partial \phi}{\partial \sigma_{ik}} \right)_T. \quad (25)$$

A Equação 24 é considerada como a definição de um sólido deformável e no Capítulo 4 é visto com maiores detalhes que um sólido elástico possui uma energia de deformação definida pela Equação 24, é interessante notar que ou a entropia ou a temperatura devem ficar constantes, isso reflete o fato de que as deformações aqui consideradas são causadas na ausência de variação de temperatura. A variação da temperatura iria gerar expansões térmicas e conseqüentemente deformações. As equações até aqui consideradas não levam em conta a variação de temperatura.



## Referências Bibliográficas

- [1] FAURIE, D. et al. Study of texture effect on elastic properties of au thin films by x-ray diffraction and in situ tensile testing. *Acta materialia*, Elsevier, v. 54, n. 17, p. 4503–4513, 2006.
- [2] FAURIE, D. et al. Measurement of thin film elastic constants by x-ray diffraction. *Thin Solid Films*, v. 469–470, n. 0, p. 201 – 205, 2004. ISSN 0040-6090. Proceedings of the 31st International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films.
- [3] LEONI, M. et al. Diffraction analysis of internal strain-stress fields in textured, transversely isotropic thin films: theoretical basis and simulation. *Philosophical Magazine A*, Taylor & Francis, v. 81, n. 3, p. 597–623, 2001.
- [4] WELZEL, U. et al. Stress analysis of polycrystalline thin films and surface regions by x-ray diffraction. *Journal of applied crystallography*, International Union of Crystallography, v. 38, n. 1, p. 1–29, 2005.
- [5] HAUKE, V. 2 - x-ray diffraction. In: *Structural and Residual Stress Analysis by Non-destructive Methods*. Amsterdam: Elsevier Science B.V., 1997. p. 17 – 65.
- [6] SANTOS, E. et al. Model for analysis of biaxial and triaxial stresses by x-ray diffraction assuming orthotropic materials. *Japanese Journal of Applied Physics*, Institute of Pure and Applied Physics, v. 49, n. 5, p. 056601, 2010.
- [7] LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Theory of Elasticity*, 3rd. [S.l.]: Pergamon Press, Oxford, UK, 1986.
- [8] GARCIA, A.; SPIM, J.; SANTOS, C. Ensaios dos materiais. *Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos*, 2000.

- [9] DALCIN, G. B. Ensaios dos materiais.
- [10] RUBIN, M.; NAGHDI, P.; MEKHONOT, T. M. teknologi le-Yisra'el. Fakultah le-handasat. *Introduction to Continuum Mechanics*. [S.l.]: Faculty of Mechanical Engineering, Technion-I.I.T., 2001. 99-100 p.
- [11] GREEN, A. E.; ZERNA, W. *Theoretical elasticity*. [S.l.]: Courier Dover Publications, 1968.
- [12] SMITH, D. R. *An introduction to continuum mechanics*. [S.l.]: Springer, 1993.
- [13] TIMOSHENKO, S.; GOODIER, J. *Teoria da Elasticidade. 3<sup>o</sup> ed., Ed.* [S.l.]: GUANABARA DOIS, 1980. 222-225 p.
- [14] TIMOSHENKO, S.; GOODIER, J. *Teoria da Elasticidade. 3<sup>o</sup> ed., Ed.* [S.l.]: GUANABARA DOIS, 1980. 6 p.
- [15] LABAKI, J. Resistência dos materiais ii. 2009.
- [16] WANG, S. et al. *Applied Elasticity*. 1953.
- [17] HIBBELER, R. *Mechanics of Materials. 1997*. [S.l.]: Prentice Hall Canada, Inc., Toronto.
- [18] AGOSTINI, F. de Souza Barbosa e B. M. Apostila de resistência dos materiais.
- [19] BRAGA, A. M. B. Mecânica dos sólidos i parte 1.
- [20] SOKOLNIKOFF, I. S.; SPECHT, R. D. *Mathematical theory of elasticity*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1956.
- [21] TERZOPOULOS, D. et al. Elastically deformable models. In: ACM. *ACM Siggraph Computer Graphics*. [S.l.], 1987. v. 21, n. 4, p. 205–214.
- [22] TIMOSHENKO, S.; GOODIER, J. *Theory of Elasticity. 3<sup>o</sup> ed., Ed.* [S.l.]: Mc Graw-Hill, 1970. 25-26 p.
- [23] WEBSTER, G.; EZEILO, A. Residual stress distributions and their influence on fatigue lifetimes. *International Journal of Fatigue*, Elsevier, v. 23, p. 375–383, 2001.

- [24] CHANTIKUL, P.; LAWN, B.; MARSHALL, D. Micromechanics of flaw growth in static fatigue: influence of residual contact stresses. *Journal of the American Ceramic Society*, Wiley Online Library, v. 64, n. 6, p. 322–325, 1981.
- [25] HAMMOND, D.; MEGUID, S. Crack propagation in the presence of shot-peening residual stresses. *Engineering fracture mechanics*, Elsevier, v. 37, n. 2, p. 373–387, 1990.
- [26] WANG, Y. et al. Grain-orientation-dependent residual stress and the effect of annealing in cold-rolled stainless steel. *Acta materialia*, Elsevier, v. 50, n. 7, p. 1717–1734, 2002.
- [27] FITZPATRICK, M.; LODINI, A. *Analysis of residual stress by diffraction using neutron and synchrotron radiation*. [S.l.]: Taylor and Francis, 2003. 78 p.
- [28] BRINKSMEIER, E. et al. Residual stresses—measurement and causes in machining processes. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, Elsevier, v. 31, n. 2, p. 491–510, 1982.
- [29] NELSON, D. Effects of residual stress on fatigue crack propagation. *Residual stress effects in fatigue*, ASTM STP, v. 776, p. 172–194, 1982.
- [30] JAIN, L.; MAI, Y. Stresses and deformations induced during manufacturing. part i: Theoretical analysis of composite cylinders and shells. *Journal of composite materials*, Sage Publications, v. 31, n. 7, p. 672–695, 1997.
- [31] HILLIER, F.; LIEBERMAN, G.; MARKLUND, J. *Introduction to operations research*. [S.l.]: Holden-Day, 1969.
- [32] MARSHALL, D.; LAWN, B. Flaw characteristics in dynamic fatigue: the influence of residual contact stresses. *Journal of the American Ceramic Society*, Wiley Online Library, v. 63, n. 9-10, p. 532–536, 1980.
- [33] ELICES, M. Influence of residual stresses in the performance of cold-drawn pearlitic wires. *Journal of materials science*, Springer, v. 39, n. 12, p. 3889–3899, 2004.
- [34] TENG, T.-L.; CHANG, P.-H.; TSENG, W.-C. Effect of welding sequences on residual stresses. *Computers & Structures*, v. 81, n. 5, p. 273 – 286, 2003. ISSN 0045-7949.

- [35] LU, J. Handbook of measurement of residual stresses. 1996.
- [36] RENDLER, N.; VIGNESS, I. Hole-drilling strain-gage method of measuring residual stresses. *Experimental Mechanics*, Springer, v. 6, n. 12, p. 577–586, 1966.
- [37] PREVEY, P. X-ray diffraction residual stress techniques. *ASM International, ASM Handbook.*, v. 10, p. 380–392, 1986.
- [38] ASTM, E. 837-01. *Standard Test Method for Determining Residual Stresses by the Hole-Drilling Strain-Gage Method.*
- [39] MATHAR, J. Determination of initial stresses by measuring the deformation around drilled holes. *Trans. ASME*, v. 56, n. 4, p. 249–254, 1934.
- [40] SCHAJER, G. Application of finite element calculations to residual stress measurements. *Journal of Engineering Materials and Technology*, v. 103, p. 157, 1981.
- [41] SCHAJER, G. Measurement of non-uniform residual stresses using the hole-drilling method. *J. Eng. Mater. Technol.:(United States)*, Weyerhaeuser Technology Center, Tacoma, WA (US), v. 110, n. 4, 1988.
- [42] LU, J.; FLAVENOT, J. Applications of the incremental hole-drilling method for measurement of residual-stress distribution. *Experimental Techniques*, Wiley Online Library, v. 13, n. 11, p. 18–24, 1989.
- [43] SCHAJER, G. An alternate computational approach to strain-gage rosette data reduction. *Experimental Techniques*, Wiley Online Library, v. 14, n. 2, p. 54–57, 1990.
- [44] HOUTTE, P. V.; BUYSER, L. D. The influence of crystallographic texture on diffraction measurements of residual stress. *Acta metallurgica et materialia*, Elsevier, v. 41, n. 2, p. 323–336, 1993.
- [45] NOYAN, I.; COHEN, J. Residual stresses. *Spring-Verlag, Berlin*, 1987.
- [46] IVANOV, S.; MONIN, V.; TEODÓSIO, J. New methods of x-ray tensometry. In: *Proceedings of Tenth International Conference on Experimental Mechanics, Lisbon, Portugal*. [S.l.: s.n.], 1994. p. 18–22.

- [47] GUROVA, T. et al. Variation of the residual stress state in a welded joint during plastic deformation in a 5.0% cr and 0.5% mo steel. *The Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, Prof Eng Publishing, v. 32, n. 6, p. 455–459, 1997.
- [48] BUNGE, H. J.; MORRIS, P. R. *Texture analysis in materials science: mathematical methods*. [S.l.]: Butterworths London, 1982.
- [49] DELHEZ, R.; KEIJSER, T. H. D.; MITTEMEIJER, E. Determination of crystallite size and lattice distortions through x-ray diffraction line profile analysis. *Fresenius' Zeitschrift für analytische Chemie*, Springer, v. 312, n. 1, p. 1–16, 1982.
- [50] TAMURA, N. et al. Scanning x-ray microdiffraction with submicrometer white beam for strain/stress and orientation mapping in thin films. *Journal of Synchrotron Radiation*, International Union of Crystallography, v. 10, n. 2, p. 137–143, 2003.
- [51] MITTEMEIJER, E. J.; SCARDI, P. *Diffraction analysis of the microstructure of materials*. [S.l.]: Springer, 2004.
- [52] SCARDI, P.; LEONI, M.; DELHEZ, R. Line broadening analysis using integral breadth methods: a critical review. *Journal of Applied Crystallography*, v. 37, n. 3, p. 381–390, Jun 2004.
- [53] MITTEMEIJER, E. J.; WELZEL, U. The “state of the art” of the diffraction analysis of crystallite size and lattice strain. *Zeitschrift für Kristallographie*, Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH München, Germany, v. 223, n. 9, p. 552–560, 2008.
- [54] NOYAN, I.; HUANG, T.; YORK, B. Residual stress/strain analysis in thin films by x-ray diffraction. *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, Taylor & Francis, v. 20, n. 2, p. 125–177, 1995.
- [55] EIGENMANN, B.; MACHERAUCH, E. Röntgenographische untersuchung von spannungszuständen in werkstoffen. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, Wiley Online Library, v. 26, n. 3, p. 148–160, 1995.
- [56] HAUKE, V. *Härt-tech*, 1995.
- [57] DOLLE, H. The influence of multiaxial stress states, stress gradients and elastic anisotropy on the evaluation of (residual) stresses by x-rays. *Journal of applied crystallography*, International Union of Crystallography, v. 12, n. 6, p. 489–501, 1979.

- [58] GONZALES, M. C. Análise numérico-experimental das tensões residuais induzidas por jateamento com granalha em molas automotivas. Biblioteca Digital de Teses e Dissertações da USP, 2012.
- [59] CHEN, D. et al. Influence of the texture on raman and x-ray diffraction characteristics of polycrystalline aln films. *Thin Solid Films*, v. 517, n. 2, p. 986 – 989, 2008.
- [60] KAMMINGA, J.-D. et al. New methods for diffraction stress measurement: a critical evaluation of new and existing methods. *Journal of applied crystallography*, International Union of Crystallography, v. 33, n. 4, p. 1059–1066, 2000.
- [61] MA, M.; CHAWLA, K. *Mechanical Metallurgy: Principles and Applications*. [S.l.]: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1984.
- [62] MACHERAUCH, E.; MÜLLER, P. Das  $\sin^2 \psi$ -verfahren der röntgenographischen spannungsmessung. *Zeitschrift für angewandte Physik*, v. 13, n. 7, p. 305, 1961.
- [63] WELZEL, U.; MITTEMEIJER, E. J. Diffraction stress analysis of macroscopically elastically anisotropic specimens: On the concepts of diffraction elastic constants and stress factors. *Journal of applied physics*, AIP, v. 93, n. 11, p. 9001–9011, 2003.
- [64] VOIGT, W. *Lehrbuch der kristallphysik*. [S.l.]: BG Teubner, 1910.
- [65] REUSS, A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, Wiley Online Library, v. 9, n. 1, p. 49–58, 1929.
- [66] LEEUWEN, M. V.; KAMMINGA, J.-D.; MITTEMEIJER, E. Diffraction stress analysis of thin films: Modeling and experimental evaluation of elastic constants and grain interaction. *Journal of applied physics*, AIP, v. 86, n. 4, p. 1904–1914, 1999.
- [67] ESPINOSA, H.; PROROK, B. Size effects on the mechanical behavior of gold thin films. *Journal of Materials Science*, Springer, v. 38, n. 20, p. 4125–4128, 2003.