

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

Programação

Horário	23-Sexta	24-Sábado
8:00	Curso -MEV	-----
8:30	Curso -MEV	Palestra 1
9:00	Curso -MEV	Café
9:30	Café	Palestra 2
10:00	Curso -MEV	Palestra 3
10:30	Curso -MEV	" "
11:00	Curso -MEV	Palestra 4
12:00- 13:00	Almoço	Almoço
14:00	Registro	Palestra 5
15:00	Registro	Palestra 6
16:00	Registro	Café
16:30	Abertura	Palestra 7
17:30	Painéis	-----
18:30	Painéis	-----

Palestra	Palestrante	Título
1	Dr. José Marcos Sasaki (UFC)	<i>Síntese e caracterização de nanopartículas pelo método sol-gel proteico</i>
2	Dr. Paulo Atsushi Suzuki (USP)	<i>Estabilidade e estrutura cristalina de soluções sólidas de silicetos de metais de transição.</i>
3	Dra. Waltraud M Kriven (UIUC)	<i>In situ high temperature synchrotron studies of ceramics to 2,000°C in air</i>
4	Dr. Luis Gallego Martinez (IPEN)	<i>Utilização do Feixes de Nêutrons no Reator Multipropósito Brasileiro - RMB</i>
5	Fellipe Ferreira (dpUNION)	<i>Equipamentos p/ Caracterização de Materiais</i>
6	Dr. Akihiko Iwata (Rigaku/Dairix)	<i>Particle size analysis of submicron domain using ultra small angle X-ray scattering method</i>
7	MSc Rodrigo U. Ichikawa (IPEN)	<i>Determinação do tamanho médio e deformação de cristalitos através da análise de perfis de difração</i>



IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

IN-SITU HIGH TEMPERATURE SYNCHROTRON STUDIES OF CERAMICS

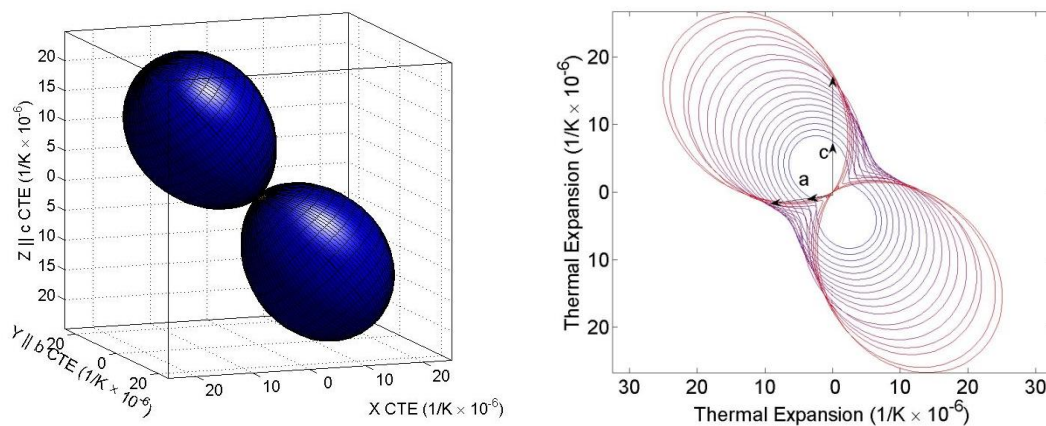
W. M. Kriven,

Department of Materials Science and Engineering,

University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois, 61801, USA

Abstract

Phase transformations in oxide ceramics can occur at exceedingly high temperatures up to 2,000°C and beyond. In order to elucidate the mechanisms of crystal structure changes, direct in situ observations are exceedingly difficult by microscopy techniques (e.g. SEM, TEM). Here we discuss an in situ powder diffractometry technique using synchrotron radiation. The experimental apparatus is a four halogen lamp furnace (heating to 2,000 °C in air) and a curved image plate detector capable of collecting high resolution X-ray diffractometry spectra ($\pm 0.008^\circ$ in 2θ) in 20 seconds. The data is analyzed by the Rietveld profile fitting method, from which are extracted lattice parameters and (hkl) d-spacings as a function of temperature. The progressive changes in (hkl) d-spacings are plotted in 3-D using a computer algorithm (CTEAS) which depicts the quadratic surface for all of the observed (hkl) d-spacings. In the case of non-orthogonal crystals such as monoclinic, the principal strains due to the thermal expansion ellipsoids are oriented in crystallographic directions which do not necessarily lie along the unit cell axes. By following the principal thermal expansion strains from one phase to another through a phase transition, a 3-D lattice correspondence can be postulated. This approach is illustrated by in situ high temperature studies of the monoclinic to tetragonal transformations in hafnia (HfO_2) at 1750 °C on heating, zirconia (ZrO_2) at 1170 °C on heating, and the pure ferroelastic transformations in the rare earth niobates (YNbO_4 , DyNbO_4 , LaNbO_4) which transform at $\sim 860^\circ\text{C}$. Phase transformations in the rare earth tantalates and tungstates have been studied.



Examples of 3-D quadratic surface of thermal expansions in (hkl) planes in monoclinic HfO_2 .

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS, MECÂNICAS E ESTRUTURAIS DOS COMPOSTOS DO TIPO REXO4 E REMO

G.Barros; I.Guedes; A.P.Ayala

Abstract

Devido as suas propriedades físicas e químicas, os compostos REXO4, onde RE é um elemento terra rara (grupo dos lantanídeos, aos quais se juntam o Escândio “Sc” e o Ítrio “Y”) e X corresponde aos elementos Arsênio (As), Fósforo (P) ou Vanádio (V), são bastante estudados em virtude de suas possíveis aplicações tecnológicas. Alguns destes materiais são utilizados como termosfósforos, células de combustível, sensores de hidrogênio, e meios para armazenagem de lixo nuclear. Eles são não higroscópicos e apresentam alta resistência a danos por radiação [rigidez Mohs ~ 5,5]. Quando dopados com outros RE, estes materiais apresentam longos tempos de vida de luminescência, intensas bandas de absorção e grande eficiência luminosa. Por isso possuem potenciais aplicações como materiais ópticos avançados. Também podem ser utilizados como possíveis refrigerantes magnéticos e sensores associado com suas transições de fases antiferromagnéticas em baixas temperaturas, devido ao efeito Jahn-Teller e ao acoplamento tipo spin-rede dos elementos terras-raras.

A INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO NA RECRISTALIZAÇÃO REVESTIMENTO BIOATIVO FORMADO POR HA-TIO2 APLICADO À LIGA TI- 6AL-4V ATRAVÉS DO PROCESSO PLASMA SPRAY.

Rocha, R.C.*; Galdino, A.G. S; Machado, M.L.P; Barcelos, M.A

Abstract

O presente trabalho avaliou a influência do tratamento térmico na recristalização do compósito formado por hidroxiapatita (HA) e Titânia (TiO₂) aplicado à liga Ti-6Al-4V através do processo Plasma Spray. A adição da Titânia à hidroxiapatita produziu um revestimento uniforme e isento de trincas. Quanto às fases formadas observou-se que após aspersão térmica a plasma spray ocorreu a formação de fase amorfa de fosfato de cálcio e de rutilo. Entretanto, após o tratamento térmico a 750 °C ocorreu a recristalização da hidroxiapatita com a presença de fase betaTCP e rutilo. As fases e o grau de cristalinidade do revestimento foram observadas por difração de raios-X. Já a integridade e o mecanismo de formação do revestimento foram avaliados por microscopia óptica e eletrônica de varredura.

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

SÍNTESE DE NANOPARTÍCULAS DE OURO COMO SISTEMAS PRECURSORES DE BIOSSENSORES

Wanderson J. Kejjok (IC), Jairo P. Oliveira (PQ), Adilson R. Prado (PG), Maria J. Pontes (PQ),
Moises R. N. Ribeiro (PQ), Breno V. Nogueira (PQ), Marco C. C. Guimarães (PQ).

Abstract

Biossensores são dispositivos que utilizam componentes biológicos como elementos de reconhecimento, ligados a um sistema de detecção, transdução e amplificação do sinal gerado na reação com o analito-alvo. Podem ser utilizados diversos elementos, sendo os principais aqueles baseados em nano materiais devido sua alta especificidade e sensibilidade. O presente trabalho mostra a síntese de nanopartículas de ouro como sistema precursor de biossensores. É interessante ressaltar que há estudos atuais que mostram a viabilidade da utilização de nanoestruturas em sistemas de detecção de hormônios, glicose, ureia, ácido lático e lactose[1]. Uma grande evolução nos mecanismos de detecção é a introdução das fibras ópticas como sonda, fato que possibilita a miniaturização dos sistemas, além do aumento da sensibilidade e rapidez nos resultados das análises. Nesse trabalho foi explorada a síntese das nanopartículas e em trabalhos futuros será estudado sistemas de detecção com o auxílio de uma fibra óptica.

X-RAY DIFFRACTION AND RIETVELD REFINEMENT FOR GDAL2 AND HOCO2 NANOPARTICLES:

Vinícius Gomes de Paula; Lisandro Pavie Cardoso; Adenilson Oliveira os Santos; Luzeli
Moreira da Silva

Abstract

The x-rays diffraction phenomena became, since its discovery at the XIX century, a powerful toll in order to understand the structural properties of many different crystalline materials and is have been used at numerous research fields, like chemistry, physics, engineering and biology. Such phenomenon is the result of coherent scattered x-rays waves by a sample material, being governed by Bragg's Law. The diffraction of the incident radiation occurs because a typical x-ray wavelength have the same magnitude order of the inter atomic distances of the atoms in the solids. When the material under study is made of a periodic arrangement of atoms (a crystal) it is possible to observe well defined "peaks" at the interference pattern, whose contains all the information regarding the structure of the material, for example: unit cell dimensions, symmetry group determination, interplanar distances, quantitative phase analysis and crystallite size. So, in order to obtain all this information it is necessary analyze the diffraction data, there are many techniques to characterize polycrystalline materials, but by far the most common is the Rietveld Refinement. The main purpose is to refine a theoretical line profile data until it matches the observed diffraction pattern by means of a least square approach. The quantity to be minimized is sometimes called the "Rietveld residual" and is the sum of the weighted squared differences among the calculated and observed intensity of the peaks.

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

Comissões

Organização Nacional

- Dr. Jesualdo Rossi - IPEN/USP
- Dr. Hamilton Perez Corrêa - UFMS
- Dr. Luis Gallego Martinez - IPEN/USP
- Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando - UFES - PPGEM

Organização Local - UFES

- Dra. Janaina Bastos Depianti - Gemologia
- Arthur Sant'Ana Cavichini - mestrando PPGEM
- Mariana Xavier Milagre - mestranda PPGEM
- Caruline de Souza Machado - mestranda PPGEM
- Jefferson Rodrigues - doutorando PPGFIS

Científica

- Dr. Luis Gallego Martinez - IPEN/USP
- Dr. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando - UFES - PPGEM
- Dr. José Marcos Sasaki - UFC
- Dr. Jesualdo L. Rossi - IPEN - USP
- Dr. Paulo Atsushi Suzuki - USP

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

LISTA PARTICIPANTES

012	Adriano Correa Batista	UFOP
064	Alessandra Casagrande Ribeiro	UFES
005	ANDERSON DO NASCIMENTO ROUVER	UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPIRITO SANTO
027	Andre Juda Correa de Andrade	UFES - Universidade Federal do Espirito Santo
037	Artur Pratti de Barros	UFES
026	Augusto Ferrari Santos	UFES
039	Caio Pereira Azevedo	Universidade Federal do Espírito Santo
063	Camelita Zacchi Scolforo	UFES
040	Caruline de Souza Carvalho Machado	UFES
043	Christiano Jorge Gomes Pinheiro	UFES
008	Cyntia Eliane Soave	TECPAR-Instituto de Tecnologia do Paraná
031	Daniel Silva Calheiro	Universidade Federal do Espírito Santo
033	Diego Barbosa Miranda	UFES - Universidade Federal do Espirito Santo
013	Diego Freire Vieira	Universidade Estadual de Goias
004	Diego Silva da Rocha	UFES
050	Emanuel José Reis de Oliveira	Instituto Federal do Espírito Santo
018	Érica Simões Rodrigues	IFES - Instituto Federal do Espírito Santo
055	Erika Laurina Oliveira da Piedade	UFES
015	Ernando Silva Ferreira	Universidade Estadual de Feira de Santana
017	EVANDRO GIUSEEPPE BETINI	UFES
022	Fellipy Ferreira	dpUNION
025	Filipe Luppi Moreira	UFES
014	Glaydson Francisco Barros de Oliveira	UFERSA
011	Hellen Cristine Prata de Oliveira	UFOP
007	HIURY VOLTZ	INSTITUTO FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO IFES
035	Ivam Pretti	UFES
002	Ivan Meloti Capucho	UFES
045	Janaina Bastos Depianti	UFES
006	Joelma Krugel Brites	IFES
047	José Antônio Ramiro Avelar	Ufes
052	JULIANA NUNES OLIVEIRA PINTO	UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPIRITO SANTO
048	Kristian Cavalcanti Santos	Prefeitura Municipal de Marataízes
034	Leandro Prates Ferreira de Almeida	UFES

IV Workshop of Applied Crystallography to Materials Science and Engineering

23 a 25 de Maio de 2014 - Vitória – ES - Brasil

054	leonardo peres	UFES
016	Lorena Raphael Rodrigues	IFES
023	Manuel Ernesto Dionisio Salazar Schiaffino	Universidade Federal do Espírito Santo
019	Marcelo Cruz dos Santos	ufes
042	Marcos da Costa Sabatini	UFES
059	Mariana Bertonceli Silva	UFES
041	Mariana Xavier Milagre	UFES
024	Mayane Mesquita	UFES
058	Panmela Pereira Merlo	UFES
038	Renan Carreiro Rocha	IFES
010	Rodrigo Matiello Oliveira	UFES
036	Rodrigo Soares dos Santos	UFES
029	Rômulo Maziero	IFES
044	Valdi Antonio Rodrigues Junior	IFES
056	Vinícius Gomes de Paula	UNICAMP
009	Vinícius Toneto Abílio	UFES
053	Weverton Ferreira Barros	UFES
049	Willian Luiz Magri	UFES