



## *Relatório*

### *XXIII Reunião da ABCr*

&

*7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Engenharia de Materiais*

**UFES - Vitória – ES**  
**5 a 9 de Setembro 2017**

#### **Comissão Organizadora (ABCr)**

Márcia C. A. Fantini (presidente ABCr- USP)  
Marcos T. D. Orlando (vice-presidente - ABCr- UFES)  
Íris C. L. Torriani (tesoureira – ABCr- UNICAMP)  
Nivaldo L. Speziali (secretário ensino e comunicação – ABCr - UFMG)  
Paulo Atsushi Suzuki (secretário – ABCr -USP)

#### **Comitê Científico**

Alejandro Pedro Ayala (UFC)  
Eduardo M. Granado (UNICAMP)  
Guinther Kellerman (UFPR)  
Javier Ellena (USP)  
Helio Tolentino (LNLS)  
Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando (UFES – Chairman)

#### **Comitê Organizador Local**

Arthur Sant'Ana Cavichini (UFES)  
Carlos Augusto Cardoso Passos (UFES)  
Estéfano Aparecido Vieira (IFES)  
Flavio Antônio de Moraes Pinto (IFES)  
Janaína Bastos Depianti (UFES)  
José Luis Passamai Jr. (UFES)  
José Firmino Salvador (IFES)  
João Batista R. Martins (ArcelorMittal-Global R&D/IFES)  
Joelma Krugel Brites (IFES)  
Mariane Gonçalves de Miranda (UFES)

#### **Apoio:**

**CAPES, CNPQ, CREA-ES, ArcelorMittal, BRUKER, RIGAKU-DAIRIX, Malvern-Panalytical, Facto, Instituto Federal do Espírito Santo, Universidade Federal do Espírito Santo, VALE, Grupo de Física Aplicada-UFES, Prefeitura de Vitória, Planetário de Vitória.**

**Relatório de Atividades**  
**XXIII Reunião da Associação Brasileira de Cristalografia (ABCr)**  
**(Evento satélite) 7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Engenharia de**  
**Materiais**  
**Universidade Federal do Espírito Santo**  
**05 a 09 de setembro de 2017**



Participantes da XXIII Reunião ABCr 2017 na UFES, Vitória, ES, Brasil (08/09/2017)

No ano de 2017 ocorreu a **Vigésima Terceira Reunião da Associação Brasileira de Cristalografia (XXIII Reunião ABCr)**. As atividades da Reunião foram precedidas nos dias 05 a 07-09-2017 pela realização do evento satélite denominado **7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Engenharia de Materiais**. Os eventos foram patrocinados pela ABCr, CAPES, CNPQ, CREA-ES, ArcelorMittal, BRUKER, RIGAKU-DAIRIX, Malvern-Panalytical, Facto, Instituto Federal do Espírito Santo, Universidade Federal do Espírito Santo, VALE, Grupo de Física Aplicada-UFES, Prefeitura de Vitória, Planetário de Vitória e a Coordenadoria de Pós-Graduação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFES.

## 1. Programação Geral

05 a 07 de Setembro		08 de setembro	09 de setembro
<u>Evento satélite</u>		<u>23ª Reunião da ABCr</u>	
<i>VII Workshop de Cristalografia Aplicada a Ciências e Engenharia de Materiais</i>	09:00	<b>RECEPÇÃO / INSCRIÇÕES</b>	<b>PLENÁRIA 2</b> Adriana Serquis (Instituto Balseiro, CAB, Argentina)
	09:30		
----- <u>05 de Setembro</u> -----	09:30	<b>ABERTURA</b> Marcos Tadeu, Márcia Fantini, Iris Torriani, Nivaldo Speziali (ABCr)	
<i>Xabier Turrillas (ICMB, Espanha)</i> <b>XRD</b> (05/Set, 8:00 - 12:00) (Auditório UFES)	10:00	<b>CONFERÊNCIA 1</b> Fabio Furlan Ferreira (UFABC)	<b>CONFERÊNCIA 3</b> Artur Torres Cordeiro (CNPEM, LNBio)
	10:30		
<i>Carlos A. Pérez (CNPEM, LNLS)</i> <b>XRF</b> (05/Set, 14:00 - 15:30) (Auditório UFES)	10:30	INTERVALO	INTERVALO
	11:00	<b>FOTO OFICIAL</b>	
<i>Angelo Malachias (UFMG)</i> <b>XRD</b> (05/Set, 16:00 - 17:30) (Auditório - UFES)	11:00	<b>PLENÁRIA 1</b> Simon Billinge (Columbia University, USA)	<b>APRESENTAÇÕES DE EMPRESAS (Bruker)</b>
	11:30		<b>APRESENTAÇÕES DE EMPRESAS (Panalytical)</b>
<i>André Luis Pinto (CBPF)</i> <b>EBSD</b> (05/Set, 11:00 - 22:00) (Auditório IFES)	11:30	<b>CONFERÊNCIA 2</b> Narcizo Marques Souza Neto (CNPEM, LNLS)	<b>APRESENTAÇÕES DE EMPRESAS (Rigaku)</b>
	12:00		
	12:30	Almoço	
	14:00	<b>COMUNICAÇÕES ORAIS</b>	
----- <u>06 de Setembro</u> -----	14:00	14:00 Cristiano L. P. Oliveira (USP)	14:00 – Yvonne P. Mascarenhas (USP)
<i>Aldo Craievich (USP)</i> (06/Set, 8:30 – 10:00) (Auditório UFES)	15:00	14:20 Bernardo L. Rodrigues (UFMG)	14:20 – Carlos B. Pinheiro (UFMG)
		14:40 Marcelo B. de Andrade (USP)	14:40 – Xabier Turrillas (ICMAB)
<i>Marcia C. A. Fantini (USP)</i> (06/Set, 10:30 – 12:00) (Auditório UFES)		15:00 Silvana Guilardi (UFU)	15:00 – Natalia A. Failache (URU)
<i>Guinther Kellermann (UFPR)</i> (06/Set, 15:00 – 16:00) (Auditório UFES)	15:20	Intervalo	Intervalo
	16:00		
<i>Simon Billinge</i> (Columbia University, USA)	16:00	<b>PAINÉIS A</b> (autores de painéis pares)	<b>PAINÉIS B</b> (autores de painéis ímpares)
<i>Pair Distribution Function</i> (07/Set, 9:00 - 17:00) (Auditório - UFES)	17:50	<b>ASSEMBLÉIA GERAL</b>	<b>CONFERÊNCIA 4</b> Yvonne P. Mascarenhas (USP)
	18:20		<b>ENCERRAMENTO</b>
	18:20		
	19:00		
	19:00	<b>CONFRATERNIZAÇÃO</b>	<b>JANTAR DE ENCERRAMENTO</b>
	20:30		

## 2. Evento Satélite: 7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Ciências e Eng. de Materiais

A coordenação do **7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Engenharia de Materiais** ficou a cargo dos Profs. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando da UFES e da Profa. Marcia Carvalho de Abreu Fantini da USP. Eles foram responsáveis pela organização das apresentações relativas às diferentes aplicações de raios X nas áreas das Engenharias.

Foram ofertadas oficinas com 8 horas sobre EBSD (*Electron Backscattered Diffraction*) pelo Prof. André Pinto do CBPF no Instituto Federal do Espírito Santo, "Pair Distribution Function" pelo Prof. Simon Billinge da Columbia University (USA). Além disso, foram ministradas palestras introdutórias sobre o uso da difração de raios X na indústria do cimento pelo Prof. Xabier Maiterra Turrillas (ICMB – Espanha) e SAXS pelo Prof. Aldo Craievich (USP) e também sobre técnicas de raios X aplicadas a uma extensa gama de problemas tecnológicos.

O **7º Workshop de Cristalografia Aplicada a Engenharia de Materiais** contou com **53 participantes**, sendo distribuídas por categoria da seguinte forma: **10** engenheiros de CREA-ES, **20** estudantes de pós-graduação do IFES, **12** estudantes de Pós-Graduação da UFES e um total de **11** professores pesquisadores das universidades UFABC, UFES, USP, IPEN, UFMG. As oficinas tiveram o apoio logístico de funcionários e alunos da Pós-Graduação do Programa de Engenharia Mecânica da UFES, além dos membros da diretoria da ABCr.

## 3. XXIII Reunião ABCr

A **coordenação geral da reunião ABCr**, foi responsabilidade dos membros do **Comitê Organizador da ABCr e o Comitê Organizador Local**. Para agilizar as ações, uma Comissão formada por cinco membros da Diretoria da ABCr concentraram as tarefas da organização em Vitória: a Profa. Márcia C. A. Fantini (IF-USP), Presidente da ABCr; o Prof. Marcos Tadeu D'Azeredo Orlando (UFES), Vice-Presidente da ABCr e *Chair* da Reunião; a Profa. Iris L. Torriani (IFGW-UNICAMP), Tesoureira da ABCr; o Prof. Nivaldo L. Speziali (IF-UFMG), Secretário de Ensino e Comunicação da ABCr e o Prof. Paulo Atsushi Suzuki (EEL-USP), Secretário da ABCr. Esta Comissão recebeu apoio logístico da equipe técnica e administrativa do PPGEM da UFES, assim como de outros membros da ABCr. O apoio do CREA-ES, dos pesquisadores do Grupo de Física Aplicada da UFES e de pesquisadores da Arcelor Mittal também foi relevante para o sucesso do evento.

A **XXIII Reunião da ABCr** foi mais uma excelente ocasião para congregar os pesquisadores, profissionais e estudantes da área de Cristalografia no âmbito nacional. Ao ser organizada conjuntamente com a participação de pesquisadores internacionais como Adriana Serquis (Instituto Balseiro - Argentina), Simon Billinge (Columbia University – USA), Xabier Turrillas (ICMAB – Espanha) o encontro ganhou um caráter internacional, com grande significância para a ciência brasileira e latino-americana.

O evento contou com a presença de **121 participantes (~89% dos 135 inscritos)**, tendo como fator motivador a presença de pesquisadores palestrantes com notório reconhecimento científico e experiência.

O programa contou com palestras plenárias, proferidas por dois conferencistas convidados:

1. **Simon Billinge** (*Columbia University, USA*), com a palestra plenária:

***The nanostructure problem: challenges, progress, opportunities.***

A palestra do Prof. Simon Billinge abordou sua visão sobre materiais modernos para tecnologias de próxima geração, tais como os usados na conversão e armazenamento de energia, remediação ambiental e saúde. Ele expos como esses materiais são altamente complexos, muitas vezes heterogêneos e nanoestruturados. Em sua visão a compreensão completa da estrutura desses materiais exige que se vá além da Cristalografia, estudando os componentes locais aperiódicos da estrutura, que é um grande desafio experimental. Ele mostrou que existem recentemente novos desenvolvimentos experimentais e teóricos potentes que estão nos aproximando de poder resolver este problema, variando de métodos em pó para partículas únicas. Ele forneceu uma visão pessoal sobre o estado atual do desenvolvimento científico nesta área, destacando o que ele considera serem os principais desafios e oportunidades que surgirão, se estes puderem ser superados. Os desenvolvimentos mais interessantes estão acontecendo no estudo de problemas envolvendo física, química, matemática aplicada e biologia, sendo uma atividade de pesquisa rica e verdadeiramente interdisciplinar.

2. **Adriana Serquis** (*Centro Atômico Bariloche CNEA, Argentina*), com a palestra plenária:

**Crystallographic characterizations of materials for clean energies applications**

A Profa. Adriana Serquis discorreu sobre o papel fundamental que os novos materiais desempenham na busca de soluções para problemas de energia. Em sua pesquisa ela considera que essa é uma solução atraente para o período de transição entre combustíveis fósseis e hidrogênio, como por exemplo, o desenvolvimento de materiais para dispositivos eletroquímicos, como células de óxido sólido (SOC). SOC são dispositivos eletroquímicos altamente eficientes que podem converter uma ampla gama de combustíveis (ou seja, hidrogênio, metano, monóxido de carbono) em energia elétrica e calor no modo combustível (SOFC) ou podem gerar hidrogênio no modo eletrificador (SOEC).

Durante a palestra ela apresentou alguns dos últimos resultados obtidos no grupo de pesquisa que ela coordena envolvendo vários materiais cerâmicos destinados a dispositivos SOC. O foco foi colocado na correlação entre os aspectos microestruturais (determinados pela composição e os parâmetros de processamento) e suas propriedades físicas que determinam a eficiência dos materiais. A estabilidade estrutural e a compatibilidade química entre o eletrodo e os eletrólitos estudados foram avaliadas através da combinação de várias técnicas de caracterização, tais como microscopias eletrônicas (SEM, TEM), difração de raios X (XRD), análise química por EDS e métodos de radiação síncrotron (XANES e EXAFS), incluindo algumas técnicas *in-situ* e *in-operando*.

Além das conferências plenárias, no **programa científico** foram apresentadas **04 (quatro) conferências de 30 minutos** apresentadas por conferencistas da UFABC (Prof. Fabio Furlan Ferreira), CNPEM (Dr. Narcizo Marques de Souza Neto), CNPEM (Dr. Arthur Torres Cordeiro) e USP (Profa. Yvonne P. Mascarenhas) participantes da ABCr 2017. Além disso, foram apresentados **08 (oito) sessões de comunicações orais de 20 minutos**.

Dos **32** trabalhos apresentados (90% dos trabalhos aceitos), **21** trabalhos (72%) foram na forma de painel.

A divisão dos **32 trabalhos**, que constam do Livro de Resumos, foi:

- Oraís = 08
- Painéis por temas (21):
  1. Molecular Structure and Physical Chemical Properties = 08
  2. Materials = 05
  3. Polycrystals = 04
  4. Complementary and other methods = 1
  5. Small Molecules and Biological Macromolecules = 03

Os painéis foram montados na no hall em frente ao Auditório, onde ocorreram as palestras.

Os painéis foram avaliados pelos coordenadores de sessões, com menção especial para os seguintes trabalhos:

#### **1. Estudo Cristalográfico de Biofilmes de Kefir**

Ellen C. G. Moraes, N. S. Ferreira, R. S. Matos.

*Departamento de Física, Universidade Federal do Amapá, Macapá, Brasil*

**Apresentador:** Ellen C. G. Moraes.

#### **2. Crystal structure of the Heavy Fermion compound $\text{YbFe}_2\text{Zn}_{20}$ doped with Cd**

A. Fahl<sup>a</sup>, M. Cabrera-Baez<sup>b</sup>, M. A. Avila<sup>b</sup>, C. Adriano<sup>c</sup>, C. Giles<sup>a</sup>, D. Rigitano<sup>c</sup>, E. Granado<sup>c</sup>

*(a)Department of Condensed Matter Physics, "Gleb Wataghin" Institute of Physics, University of Campinas – UNICAMP, CEP 13083-859, Campinas, SP, Brazil.*

*(b)CCNH, Universidade Federal do ABC – UFABC, CEP 09210-580, Santo André, SP, Brazil.*

*(c)Department of Quantum Electronic, "Gleb Wataghin" Institute of Physics, University of Campinas – UNICAMP, CEP 13083-859, Campinas, SP, Brazil.*

**Apresentador:** Andre L. Fahl

O programa final encontra-se acima e todas as **atividades acadêmicas do programa** estão detalhadas no **Livro de Resumos**.

#### **4. Assembléia da Associação Científica envolvida neste Encontro**

Como costuma acontecer nas reuniões bienais da ABCr, foi realizada a Assembléia Geral dos associados nacionais, programada para o primeiro dia da reunião (08 de setembro), sendo redigida uma ata com as decisões votadas.

#### **5. Contribuição do evento para a academia e a formação de recursos humanos.**

O evento teve como principal objetivo reunir pesquisadores e jovens cientistas no início de suas carreiras, brasileiros e de países latino-americanos, convidando também cientistas de destaque do exterior para promover a integração e o intercâmbio de conhecimentos na área de Cristalografia. Este convívio de poucos dias tem sempre resultado em novas parcerias e colaborações, organização de cursos de treinamento e compartilhamento de instalações e equipamentos fundamentais para o desenvolvimento de pesquisa competitiva. Os participantes receberam certificado de participação.

A organização deste encontro científico foi patrocinado pelas agências CAPES e CNPq. Em especial, destaca-se a participação financeira expressiva do CREA-ES e da Companhia Arcelor Mittal. Os patrocinadores comerciais foram: Bruker, Rigaku/Dairix, PANalytical do Brasil, com demonstração de equipamentos de bancada e apresentações de interesse técnico.

## **6. Avaliação do evento**

A página do evento (*abcrystalografia.org.br*) recebeu inscrições de 64 pesquisadores e estudantes do Brasil e de países estrangeiros. As inscrições realizadas através do CREA-ES e IFES incrementaram o número de participantes, dos quais 121 efetivamente participaram da reunião. A distribuição dos participantes por país de origem foi a seguinte: Argentina (1), Brasil (119), Espanha (1), EUA (1), Uruguai (1). Análise geral do nível de formação dos congressistas mostra que 31 podem ser identificados como líderes de Pesquisa, 19 como pós-doutores e 63 como estudantes de pós-graduação, contando-se também 8 profissionais das empresas patrocinadoras. A participação de estudantes brasileiros de outros estados poderia ter sido maior, se os recursos aprovados pelo CNPq e pela CAPES tivessem sido liberados com o valor previsto inicialmente. Neste contexto, foi fundamental o apoio concedido e liberado pelo CREA-ES e a Companhia Arcelor Mittal, e também o apoio de empresas (Bruker, Dairix/Rigaku, PANalytical). A reunião foi planejada para ser realizada na UFES para minimizar os custos operacionais. Ela foi realizada na Semana da Pátria, quando há recesso estudantil. A UFES disponibilizou um complexo com Auditório e hall para apresentação de painéis, além de permitir a impressão de certificados de apresentação de trabalhos, resumos extras e confeccionar um bloco de 5 folhas para anotações. A Arcelor Mittal contribuiu com a impressão de certificados de participação e fornecimento de crachás. Foi também realizado levantamento de custos de hotéis, transporte aéreo e de ônibus de São Paulo, optando-se pelos menores preços oferecidos.

## **7. Conclusão**

Para finalizar, gostaríamos de ressaltar que a presente reunião representou um desafio no histórico das reuniões bienais realizadas durante mais de 40 anos de existência da ABCr. Foi necessário elaborar um programa que lograsse atender tanto os interesses da associação nacional (ABCr) como os do CREA-ES e do IFES. A escolha dos palestrantes foi indicada pelo Comitê Científico.

Todos os convidados foram pesquisadores com expressiva produção científica. Fizeram parte da reunião um grande número de pesquisadores da área de Cristalografia do país.

Foram feitos esforços para custear a presença destes pesquisadores nesta reunião conjunta. O apoio das agências brasileiras foi fundamental para viabilizar a realização deste evento.

**Marcos T. D. Orlando (vice-presidente da ABCr e *Chair* da 23ABCr)**

**São Paulo, 30 de Novembro de 2017**