

98-D.1.4

A EXTINÇÃO SECUNDÁRIA COMO EXPANSÃO EM SÉRIE DE TAYLOR. C.B.R. Parente eV.L. Mazzocchi. (Divisão de Física Nuclear, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares IPEN - CNEN/SP).

Zachariasen, em continuação à sua própria teoria da difração de raios-X em cristais, encontrou uma fórmula para o cálculo da extinção secundária presente em cristais reais (Acta Cryst. (1967). 23, 558). Posteriormente, Cooper e Rouse verificaram que a fórmula de Zachariasen não se aplicava muito bem em difração de nêutrons, particularmente em casos onde a extinção secundária era muito intensa. Propuseram então uma modificação na fórmula, introduzindo nela uma dependência do ângulo de espalhamento 2θ (Acta Cryst. (1970). A.26, 214). Becker e Coppens, baseados também na teoria de Zachariasen, encontraram uma solução mais geral para o problema da extinção, tanto em raios-X quanto em nêutrons, incluindo, da mesma forma, uma dependência de 2θ (Acta Cryst. (1974). A.30, 129). No presente trabalho, a extinção secundária é calculada a partir da fórmula de recorrência encontrada por Parente e Caticha-Ellis, para o caso de difração múltipla envolvendo alta extinção secundária (Japan. J. Appl. Phys. (1974). 13, 1501), aplicada ao caso de dois feixes. Utilizando dados reais de difração de nêutrons, uma comparação é feita entre resultados deste trabalho e os da literatura mencionados acima.

99-D.1.4

DENSIDADE DE ESTADOS EM LIGAS AMORFAS DE ZRNI COM ORDEM QUÍMICA DE CURTO ALCANCE. Jaimé Duarte Jr. e Sonia Frota-Pessôa (Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da USP).

Utilizamos o método de recorrência aliado a uma hamiltoniana LCAO parametrizada para a obtenção da densidade de estados eletrônicos em ligas amorfas de Zr Fe. Cálculos da densidade de estados no nível de Fermi para a liga de Zr Fe assim como resultados anteriormente obtidos para ligas amorfas de Zr Cu e Zr Ni apresentaram boa concordância com os resultados experimentais, excetuando-se a liga de Zr Ni na composição rica em Ni que apresentou um resultado bem acima do valor experimental. Artigos experimentais sugeriram uma possível ordem química de curto alcance em várias ligas amorfas envolvendo metais de transição. Neste trabalho foi nosso objetivo verificar se a introdução de uma ordem química de curto alcance poderia explicar a discrepância encontrada entre os cálculos teóricos e as medidas experimentais da densidade de estados no nível de Fermi em ligas amorfas de Zr Ni, nas composições ricas em Ni. Seguindo indicações da literatura construímos "clusters" amorfos apresentando ordenamento químico e "clusters" amorfos com distribuição randômica. Os resultados obtidos mostram que a introdução de ordem química de curto alcance pode realmente abaixar a densidade de estados no nível de Fermi para ligas de Zr Ni ricas em Ni levando a uma melhor concordância com os resultados experimentais. Essa concordância é mais uma indicação de existência de ordem química nesses materiais. (FAPESP, CNPq, FINEP)

100-D.1.4

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DE DIFUSÃO DO OXIGÊNIO EM TÂNTALO ATRAVÉS DA TÉCNICA DE MEDIDA DO ATRITO INTERNO*. Roberto de Lima Rodrigues**, Rosana Asche de Paula** e Tanimara Soares da Silva**.

As impurezas intersticiais tais como oxigênio, nitrogênio ou carbono em metais cúbicos de corpo centrado podem dar origem a um fenômeno de anelasticidade em função da temperatura. Este pico é conhecido como pico de Snoek. O mecanismo deste efeito é a reorientação preferencial dos intersticiais sob a ação de uma tensão aplicada.

O objetivo deste trabalho experimental é a determinação de alguns parâmetros de difusão do oxigênio em tântalo, através da medida de atrito interno em função da temperatura. A variação do atrito interno em função da temperatura foi obtida utilizando um pêndulo de torção invertido, à frequência baixa da ordem de Hertz.

A partir do resultado obtido, $Q^{-1}(T)$, supondo que o fenômeno de relaxação é simples, foram calculados os seguintes parâmetros de difusão do oxigênio em tântalo: energia de ativação do processo, fator de frequência e coeficiente de difusão. Os valores encontrados são: $H = (1,165 \pm 0,005) \text{ eV}$, $\tau^{-1} = (2,41 \pm 0,02) \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ e $D_0 = (7,29 \pm 0,06) \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$, respectivamente.

* Trabalho realizado no Depto de Metalurgia do IPEN/CNEN, São Paulo, sob orientação do Prof. Sadamu Koshimizu

** Estudantes de Graduação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo