

MET/8:00/6A.F

MODOS LOCALIZADOS DO HIDROGÊNIO NO COMPOSTO  $Ti_{0,8}Zr_{0,2}CrMnH_3$  : ESTUDO POR  
ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE NÊUTRONS LENTOS. José Mestnik Filho e Laércio Antonio Vinhas (Divisão  
de Física Nuclear, IPEN-CNEN/SP)

Os modos de vibração do átomo de hidrogênio, localizado em interstícios do composto armazenador  $Ti_{0,8}Zr_{0,2}CrMnH_3$ , foram estudados através da técnica de espalhamento inelástico de nêutrons lentos, utilizando-se o espectômetro de filtro de berílio-tempo de vôo do IPEN-CNEN/SP. Dos espectros obtidos foi possível identificar três picos com 50mev de largura total à meia altura nas energias de vibração de 85, 115 e 141mev. Para interpretar esse resultado juntamente com as intensidades dos picos, realizou-se uma análise para determinar os tipos diferentes de interstícios existentes no composto, ocupados por átomos de hidrogênio. Os interstícios são formados por quatro átomos metálicos arranjados segundo um tetraedro irregular: dois deles são Cr e Mn e os outros dois são provenientes da combinação ao acaso de Ti e Zr. Constatou-se que as três energias de vibração obtidas experimentalmente originam-se das três possíveis combinações dos átomos de Zr e Ti na formação dos interstícios. Como a natureza química dos átomos de Zr e Ti é semelhante, conclui-se também que as três energias observadas são decorrentes da diferença de tamanho desses dois átomos. A largura dos picos é devida principalmente à existência de três modos normais de vibração não degenerados para cada tipo de interstício.