

A Difractometria de nêutrons no estudo de materiais

PARENTE, C. B. R.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN/SP.

Tradicionalmente, a difratometria de nêutrons tem sido utilizada no estudo do estado cristalino da matéria como técnica complementar à difratometria de raios-X. Devido à natureza diferente da interação do nêutron com a matéria, contrariamente ao que ocorre com raios-X, a radiação neutrônica é pouco absorvida pela maioria dos elementos, a intensidade da radiação espalhada em forma coerente não mostra qualquer dependência do número atômico do átomo espalhador e não existe um fator de forma diminuindo essa intensidade conforme aumenta o ângulo de espalhamento. Adicionalmente, o nêutron interage com núcleos que possuem momento magnético, produzindo o espalhamento coerente magnético. É a baixa absorção dos nêutrons que permite, por exemplo, a determinação da textura cristalina global de uma amostra. Com raios-X, a textura observada limita-se à superfície da amostra, a não ser que uma técnica sofisticada seja empregada. Por outro lado, a determinação de estruturas cristalinas contendo átomos leves na companhia de átomos pesados, ou átomos pesados vizinhos na tabela periódica, é, em geral, mais precisa quando empregada a difratometria de nêutrons. A determinação de estruturas magnéticas é uma exclusividade desta técnica. Na última década, com a construção de fontes de nêutrons mais intensas e o desenvolvimento de detectores de posição, surgiram novas técnicas exclusivas da difratometria de nêutrons. Entre elas destacam-se a análise estrutural feita com difratometria por tempo de voo e a análise não-destrutiva das tensões residuais internas em soldas e componentes estruturais.

O difratômetro de nêutrons do IPEN-CNEN/SP, instalado junto ao reator de pesquisas IEA-R1, de 2MW de potência térmica, é um instrumento de múltiplos propósitos, automatizado por microcomputador, podendo ser utilizado em muitas das técnicas correntes de análise de materiais. Atualmente, o grupo de difratometria de nêutrons desse instituto, responsável pela operação do difratômetro, vem realizando estudos de texturas, de orientação magnética de ferrofluidos sob a ação de um campo magnético, da qualidade cristalina de monocristais através da observação da mosaicidade, de determinação de fases em sistemas multifásicos e de desenvolvimento da difração múltipla como método de análise de estruturas cristalinas e magnéticas. Alguns desses estudos são feitos em colaboração com outros grupos de pesquisa, da própria instituição ou de outras instituições.

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais e Superfícies (MAT) - 19/05/93

EFEITO DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS NAS MEDIDAS DE ATRITO INTERNO EM Nb E Nb-Ti.

FLORÊNCIO, O.; MANCINI, M. W.; QUEIROZ, J. R. O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.; BOTTA FILHO, W. J.; SILVA, J. R. G.

Universidade Federal de São Carlos

GRANDINI, C. R.; FERNANDES, R. M.

Universidade Estadual Paulista

FRANCISCO, R. H. P.; RODRIGUES, A. M. G. D.
Universidade de São Paulo

Medidas de atrito interno em função da temperatura (na faixa de 290 K a 700 K) estão sendo realizadas, num pêndulo de torção; em amostras de Nb e Nb-Ti com diferentes graus de pureza. Os resultados encontrados neste trabalho para o Nb sem o elemento substitucional Ti, são comparados com aqueles obtidos para a liga, pretendendo-se desta maneira levantar dados sobre a interação dos elementos intersticiais O e N com o

Nb puro e com a liga Nb-Ti. Os espectros de múltiplas relaxações anelásticas obtidos para estas amostras são decompostos em picos elementares devido à interação metal-intersticial. Simultaneamente são obtidos padrões de difração de Raios-X para informações sobre as estruturas cristalinas destes metais e as consequentes variações nos parâmetros da rede devido à presença dos elementos intersticiais e substitucionais, podendo ser detectadas mudanças devido a formação de novas fases. Apoio CNPq, CAPES, FINEP, FTI-CEMAR.

Estudo da interação quadrupolar elétrica na liga $ZrCr_2$: influência da absorção de hidrogênio.

MESTNIK FILHO, J.; CARBONARI, A. W.; PENDL JÚNIOR, W.; MOURA, J. I. DE; SAXENA, R. N.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN/SP

A liga $ZrCr_2$ faz parte de uma família de fases de Laves que apresentam peculiaridades interessantes no processo de absorção/liberação do gás hidrogênio como a presença de histereses e patamares inclinados nos diagramas de pressão, composição e temperatura. Estes fenômenos ainda não compreendidos do ponto de

vista microscópico devem estar associados à competição entre as várias energias envolvidas no processo de absorção de hidrogênio, tais como a energia de ligação metal-hidrogênio num sítio particular ocupado pelo hidrogênio, a energia devida à deformação elástica local da rede cristalina e a energia associada aos elétrons provenientes dos átomos de hidrogênio que são incorporados ao sistema eletrônico da liga metálica hospedeira. O estudo dos aspectos microscópicos da interação do átomo de hidrogênio com a rede cristalina dessas ligas é portanto de interesse, uma vez que pode fornecer subsídios para a compreensão dos vários fenômenos termodinâmicos observados.

Neste trabalho utiliza-se a técnica de correlação angular gama-gama perturbada com o objetivo de inferir sobre a distribuição das cargas eletrônicas ao redor do núcleo de prova. Com a medida da correlação angular perturbada determina-se o gradiente de campo elétrico (GCE) sentido pelo núcleo de ^{181}Ta , formado pelo decaimento β^- do ^{181}Hf inserido como impureza na matriz de ZrCr_2 , ocupando alguns sítios do Zr. Da diferença entre os valores dos parâmetros do GCE para a liga com e sem hidrogênio, procura-se determinar a preferência de ocupação do hidrogênio nos vários sítios existentes bem como a configuração dos átomos de hidrogênio ao redor do núcleo de prova. Resultados preliminares parecem indicar a preferência do hidrogênio em formar configurações que resultem em baixos valores do GCE mesmo em baixas concentrações de hidrogênio, o que equivale a pressupor que mesmo nestas condições vários átomos de hidrogênio distribuem-se simetricamente ao redor do núcleo de prova.

ANÁLISE DE ESPECTROS DE FREQUÊNCIA COMO FUNÇÃO DA TEMPERATURA

FERNANDES, R. M.; GRANDINI, C. R.; SHUKLA, M. M.

UNESP - BAURU

Na maior parte dos trabalhos envolvendo o estudo de relaxações anelásticas devido à reorientação induzida por tensão de átomos de impurezas intersticiais em torno de átomos da matriz metálica, seus autores apresentaram os resultados em termos de espectros de atrito interno como função da temperatura. Alguns autores mostram os espectros do quadrado da frequência como função da temperatura, sem mencionar qualquer análise ou comentário a respeito da curva. Este trabalho propõe uma relação entre o quadrado da frequência e a temperatura, para processos de relaxação que envolvem a reorientação induzida por tensão de defeitos pontuais em sólidos. Esta relação é comprovada através do "fitting" de espectros do quadrado da frequência como função da temperatura para amostras de nióbio e tântalo contendo baixas concentrações de intersticiais pesados como oxigênio e nitrogênio. (Apoio: CNPq,

Capes e FUNDUNESP).

ELECTROLYTICAL DIFFUSION OF F CENTERS IN KCl CRYSTALS

SILVA, L. F. D.

Laboratorio de Optica de Sólidos, Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María

At room temperature alkali halides are dielectric solids, whereas, at high temperatures they present electrolytic conductivity. As the current flows through the crystal, a simultaneous coloring of it takes place. If the sample polarity is reversed, then the crystal is bleached. *KCl* crystals have been electrolytically colored. Optical density hysteresis was observed during bleaching. In addition, when simultaneous measuring of current and optical transmission is made, an almost simultaneous coloring is detected within the first zone of current. An activation energy of 0.62 eV was obtained between 778 K and 850 K, corroborating earlier literature data [1,2], but at temperatures lower than 778 K, is observed the presence of another diffusion process. In this range the estimated activation energy corresponds to 1,3 eV.

1. A. K. Maiti & K. Goswami, *Solid State Commun.* 48, 517 (1983).

2. Luis F. Da Silva, *Solid State Commun.* 84, 991 (1992).

ESTUDO DA MOBILIDADE IÔNICA NO QUARTZO NATURAL USANDO A TÉCNICA DE ELETRODIFUSÃO

YUKIMITU, K.

FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA UNESP

WATANABE, S.

LABORATÓRIO DE DOSIMETRIA, DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, IFUSP

Dentre a larga utilização do quartzo, talvez a mais importante seja a sua aplicação na indústria eletrônica. A sua propriedade piezoelétrica torna-o, ainda hoje, imprescindível na fabricação de osciladores utilizados pela indústria de telecomunicações. Cite-se, ainda, a sua forma artificial vítrea que possui especiais propriedades elétricas, mecânicas e ópticas. A estrutura cristalina do quartzo apresenta, na direção do seu eixo de simetria (eixo óptico c), canais abertos onde as impurezas podem ser acomodadas. Estas impurezas (íons alcalinos principalmente) influem nas propriedades solicitadas do quartzo. Uma técnica utilizada para retirar e introduzir íons do canal é a eletrólise. Esta técnica resume-se na aplicação de um campo elétrico na direção do canal e aquecimento simultâneo da amostra de quartzo. A impureza em forma de sal que se quer difundir é previamente depositada na face em contato com o eletrodo positivo. Desta forma é possível a troca de íons no material. Desenvolvemos um equipamento de eletrólise,