

DETERMINAÇÃO DE SÍTIOS OCUPADOS POR HIDROGÊNIO EM  $ZrCr_2H_x$  ( $x = 0,45; 2$  e  $3$ ) POR ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE NÊUTRONS LENTOS, José Mestnik Filho e Jacó Izidro de Moura. ( Divisão de Física Nuclear - IPEN - CNEN/SP ).

Os sítios intersticiais de ocupação pelo átomo de hidrogênio no hidreto metálico  $ZrCr_2H_x$  foram inferidos através de espalhamento inelástico de nêutrons lentos para três concentrações de hidrogênio correspondentes a  $x = 0,45$ ,  $x = 2$  e  $x = 3$  que são respectivamente hidretos na fase de solução sólida, fase mista de solução sólida com hidreto metálico e fase de hidreto metálico saturado.

Foram encontradas quatro frequências de vibração localizada dos átomos de hidrogênio, com os seguintes valores de  $\hbar\omega = 183, 151, 133$  e  $103$  meV. Através de uma análise detalhada das intensidades relativas de ocorrência das diversas frequências e introduzindo correções devida a efeitos de espalhamento por processos de multi-fônons, observou-se que as intensidades das três frequências maiores estão na relação de 1:1:1 e foram atribuídas às vibrações do hidrogênio em um interstício tetraédrico do tipo  $Zr_2Cr_2$  em quanto que a frequência de  $103$  meV, com menor intensidade relativa, foi associada à ocupação de sítios tetraedrais do tipo  $ZrCr_3$ .

Foi observado também que a diferença de energia de ligação para os dois tipos de sítios é de  $65$  meV para  $x = 2$  e  $x = 3$  e  $49$  meV para  $x = 0,45$ , estando o sítio  $ZrCr_3$  situado no nível energético mais alto em relação ao nível energético do sítio  $Zr_2Cr_2$ .