

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 .