

(dos parâmetros de difração) apresentados dos parâmetros
adotados, para a realização experimental. Os
resultados correspondentes a modelos de
estruturas de Ge, Si, GaAs, AlAs, e InP, de-
terminam com precisão numérica as regiões de ocorrência
do campo difratado em cada situação, es-
tando alinhadas através dos valores para a fase.

FORMAS MORFOLÓGICAS DE EQUILÍBRIO EM CRISTAIS APERIÓDICOS

K. BALZUWEIT

Universidade Federal de Minas Gerais

M. KREMERS, H. MEEKES, M. A. VERHEIJEN, P.
BENNEMA

Katholieke Universiteit Nijmegen

Desde os primórdios da cristalografia, o estudo da mor-
fologia dos cristais tem desempenhado importante pa-
pel como auxílio simples na determinação de estruturas
cristalinas quanto em teorias fenomenológicas relativas
ao crescimento dos cristais.

Seguindo as mesmas leis dos índices racionais de Haüy,
a lei de Bravais-Friedel-Donnay-Harker, a teoria de
Hartman-Perdok e outras, para cristais que podemos
denominar de convencionais; pode-se estender o mesmo
tipo de tratamento para cristais aperiódicos.

Utilizamos então a idéia de um superespaço de di-
mensão maior que três, contendo a simetria de
translação perdida no espaço de dimensão três.

Analiza-se a situação de um cristal modulado incomen-
surável unidimensional com somente um vetor de onda
de modulação. E então generalizam-se os procedimen-
tos, leis e teorias na determinação das faces de equilíbrio
mais prováveis nos cristais aperiódicos; no presente caso
um cristal modulado incomensurável unidimensional.

Avaliação de parâmetros termodinâmicos a partir de dados de difração de raios-X para um mineral interestratificado Clorita/Esmectita

WILSON OTTO GOMES BATISTA

IFUFBA/CEFET-Ba

ZBIGNIEW BARAN

IFUFBA

JOAQUIM JULIO DE OLIVEIRA

IGUFBA

Em recente
comunicação (XVII ENFMC-Caxambú/1994) apresen-
tamos um modelo para tratar minerais interestratifica-
dos como cristais unidimensionais. Usamos um modelo
de Ising unidimensional através do qual podemos estabe-
lecer uma relação entre parâmetros termodinâmicos e

parâmetros cristalográficos. Para verificar os resultados
fornecidos por tal modelo usamos dados da literatura
e dados por nós obtidos através da difração de raios-
X de uma amostra de clorita/esmectita. Esta amostra
foi submetida a três tratamentos: (1) orientação pre-
ferencial, (2) orientação preferencial e saturação com gli-
coletilênico e (3) orientação preferencial e aquecimento
a 400°C durante 24 horas. Os difratogramas obtidos
das duas primeiras amostras foram suficientes para
confirmar que o material em estudo é de fato um
mineral interestratificado e também para avaliar as
proporções dos componentes clorita(0.7)/esmectita. No
difratograma obtido da amostra que foi submetida ao
aquecimento observamos o colapso parcial da esmectita,
evidenciando claramente uma interestratificação com
presença de dois espaçamentos interplanares $d^c=14.3$
Å e $d^e=10.3$ Å. Para avaliar as probabilidades p_{ab}
(a=clorita, b=esmectita) de uma camada de clorita
ser sucedida por uma camada de esmectita usamos o
método direto da transformada de Fourier (MacEwan,
1956), que consiste em obter uma função de probabili-
dade de distribuição de dois diferentes espaçamentos
interplanares. Os resultados obtidos indicam uma estru-
tura zonal irregularmente interestratificada. Estes re-
sultados foram usados para calcular o número médio de
pares vizinhos N_{ab} e comprimento médio das fileiras L_a
e desta forma avaliamos a energia de interação $w=900$
cal/mol de pares de camadas ab. Os valores calculados
estão de acordo com as previsões do modelo teórico que
determina uma energia positiva e finita para uma estru-
tura irregularmente interestratificada com tendência a
segregação independente da proporção dos componentes.

DETECÇÃO DE FALHAS DE EMPILHAMENTO NO $ZrCr_2$ E TRANSIÇÃO DE FASE NO HIDRETO $ZrCr_2H_3$ POR MEIO DA DIFRAÇÃO DE RAIOS-X E CORRELAÇÃO ANGULAR PERTURBADA DE RAIOS GAMA.

JOSÉ MESTNIK FILHO, ARTUR WILSON CARBONARI,
WILLI PENDEL JÚNIOR, JACÓ IZIDRO DE MOURA,
RAJENDRA NARAIN SAXENA

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

Foi detectada a existência de defeitos de empilhamento
no composto absorvedor de hidrogênio $ZrCr_2$ através
da correlação angular perturbada de raios gama (TD-
PAC), utilizando núcleos de ^{181}Ta ocupando sítios do
zircônio. Realizando-se um refinamento de estrutura
do $ZrCr_2$ pelo método de Rietveld e uma análise es-
trutural dos sítios de Zr próximos a uma falha de em-
pilhamento, foi observado que existem dois sítios para
os átomos de zircônio nesta liga que são responsáveis
pela presença de uma distribuição relativamente larga
de gradientes de campo elétrico nos sítios ocupados pe-
los núcleos de ^{181}Ta . Um desses sítios possui simetria

↳ Tantalum

IPEN / CNEN - SP
BIBLIOTECA
Produção Científica

IPEN-DOC- 2869

pontual $3m$, sendo um sítio normal de uma estrutura cristalina hexagonal do tipo $P6_3/mmc$. O outro sítio origina-se das falhas de empilhamento, onde, devido a um deslizamento de um plano de átomos de Cr, ocorre uma mudança na primeira vizinhança de átomos de Zr no sentido de, neste sítio, os átomos de Zr tenderem a relaxar para uma configuração local que possui simetria pontual $\bar{4}3m$, dando origem a tensões em torno do defeito.

O gradiente de campo elétrico médio e seu parâmetro de assimetria η , nos sítios ocupados pelos núcleos de

prova, são independentes da temperatura no intervalo $77 \leq T \leq 300$ K enquanto que para o hidreto $ZrCr_2H_3$ ocorre uma transição de fase em 230 K. Esta transição de fase é relativamente larga, ocorrendo no intervalo de temperatura entre 200 e 260 K. Acima da temperatura de transição de fase, a estrutura metálica do hidreto é a mesma que a da liga não hidrogenada. A estrutura do hidreto abaixo da transição de fase não é, até o momento, conhecida.