



Estudo do coeficiente de expansão térmica da Liga Fe₆₄Ni₃₆ por difração de raios x

Guilherme A. Faria, Letícia Coelho, Carlos Giles (orientador)
guilhermefar@gmail.com

Universidade Estadual de Campinas
Laboratório de Cristalografia Aplicada e Raios X – DFMC – IFGW



Palavras-Chave: Cristalografia - Invar - Difração de raios X

Introdução

Em 1897 Guillaume descobriu que ligas metálicas compostas por aproximadamente 35% Níquel e 65% Ferro com grupo espacial cúbico de face centrada apresentavam um coeficiente de expansão térmica anormalmente baixo. Esse fenômeno, chamado por seu descobridor de efeito Invar foi observado em vários outros compostos, mas ainda não foi encontrado um modelo teórico que o explique. O modelo mais popular, proposto por Weiss[1] assume que existem duas configurações de spin, uma ferromagnética com grande volume e outra paramagnética com pequeno volume e que, quando a rede cristalina sofre excitação térmica, as duas configurações interagem entre si mantendo o volume da rede constante. No entanto este modelo não é consistente com algumas observações experimentais, o que motiva uma grande quantidade de estudos sobre compostos que apresentam o efeito Invar, principalmente usando a liga FeNi, mas a explicação desse efeito permanece incompleta. As medidas expostas nesse poster foram realizadas no intuito de caracterizar uma amostra de Fe₆₄Ni₃₆ para medidas posteriores usando difração de raios x pump and probe no ESRF, que poderão mostrar variações do parâmetro de rede em um intervalo de até 100 picosegundos após a excitação térmica da amostra.

Metodologia

Usamos fatias de um botão policristalino crescido em arc-melting usando Fe 99,99% e Ni 99,95% nas proporções 64% e 36% respectivamente. Usando um difratômetro θ -2 θ com geometria Bragg-Brentano (Fig.2) fizemos difratogramas da amostra em temperaturas de 20K a 300K, com passo de 10K. Abaixo é mostrado um esquema do difratômetro no qual as medidas foram feitas:

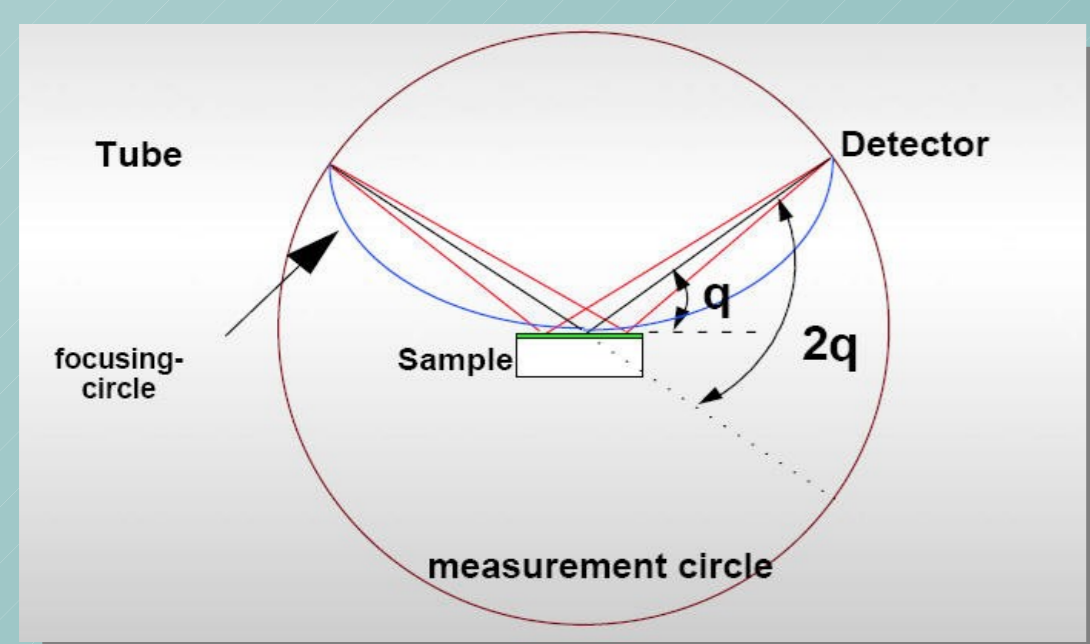


Figura 3: esquema de difratômetro θ -2 θ na geometria Bragg-Brentano, modelo usado para as medidas

Em cada difratograma é possível encontrarmos o parâmetro de rede pela Lei de Bragg (adaptada aqui para o sistema cúbico de face centrada):

$$\lambda = 2 \cdot \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)} \cdot \sin(\theta)$$

onde λ é o comprimento de onda da radiação incidente, $(h k l)$ é a orientação dos planos de Bragg para os quais a condição de difração é satisfeita, θ é o ângulo de incidência do feixe e a é o parâmetro de rede. Para encontrarmos a usamos a seguinte fórmula:

$$a = (a_i - a_{i+1}) / ((T_i - T_{i+1}) \cdot \alpha_i)$$

onde a_i é o parâmetro de rede e T_i é a temperatura para uma determinada medida i e a_{i+1} e T_{i+1} são o parâmetro de rede e a temperatura para a medida seguinte.

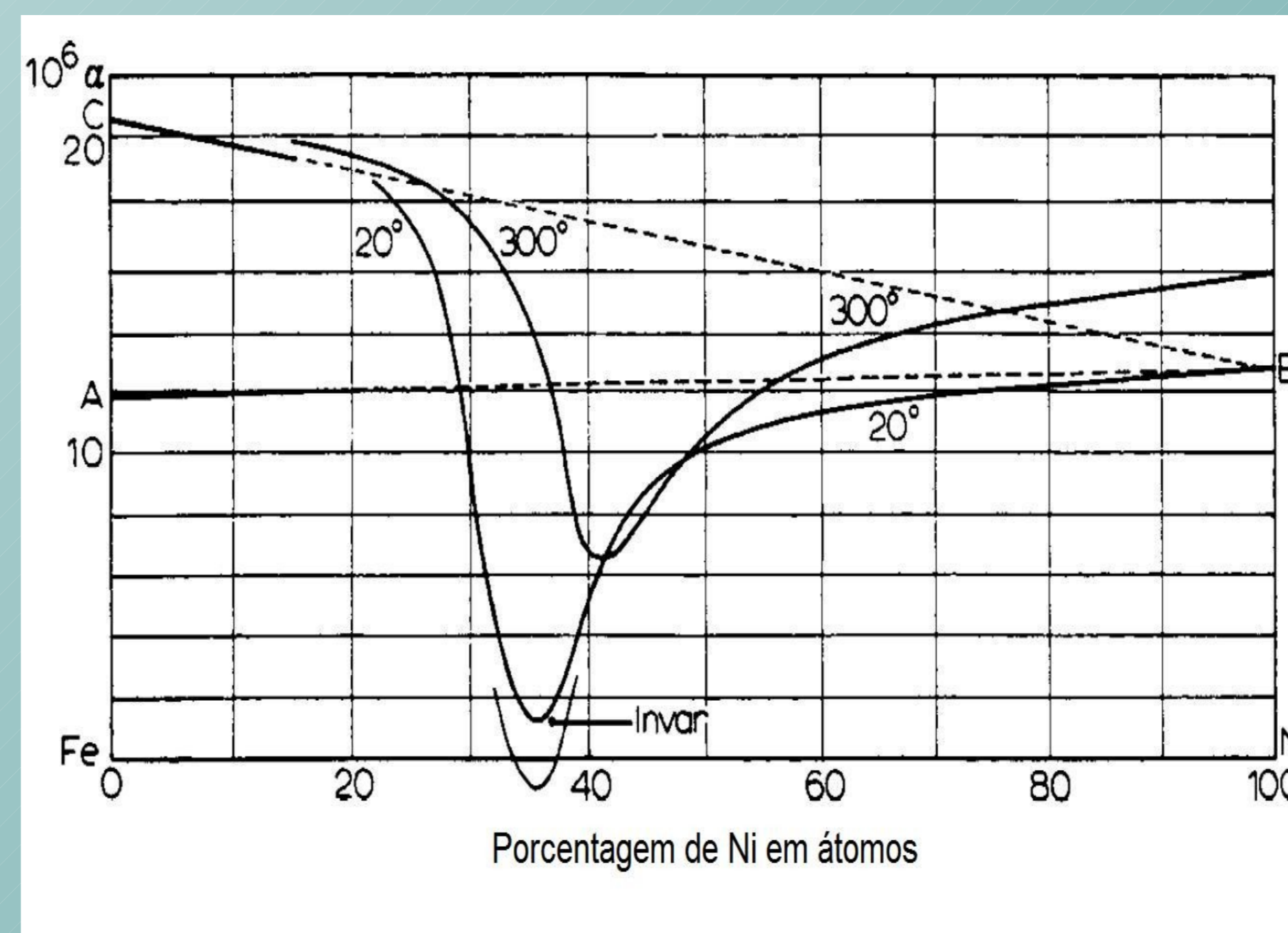


Figura 1: Gráfico que mostra o fator de expansão térmica em função da porcentagem de Ni na liga. A região que apresenta efeito Invar é mostrada [3].

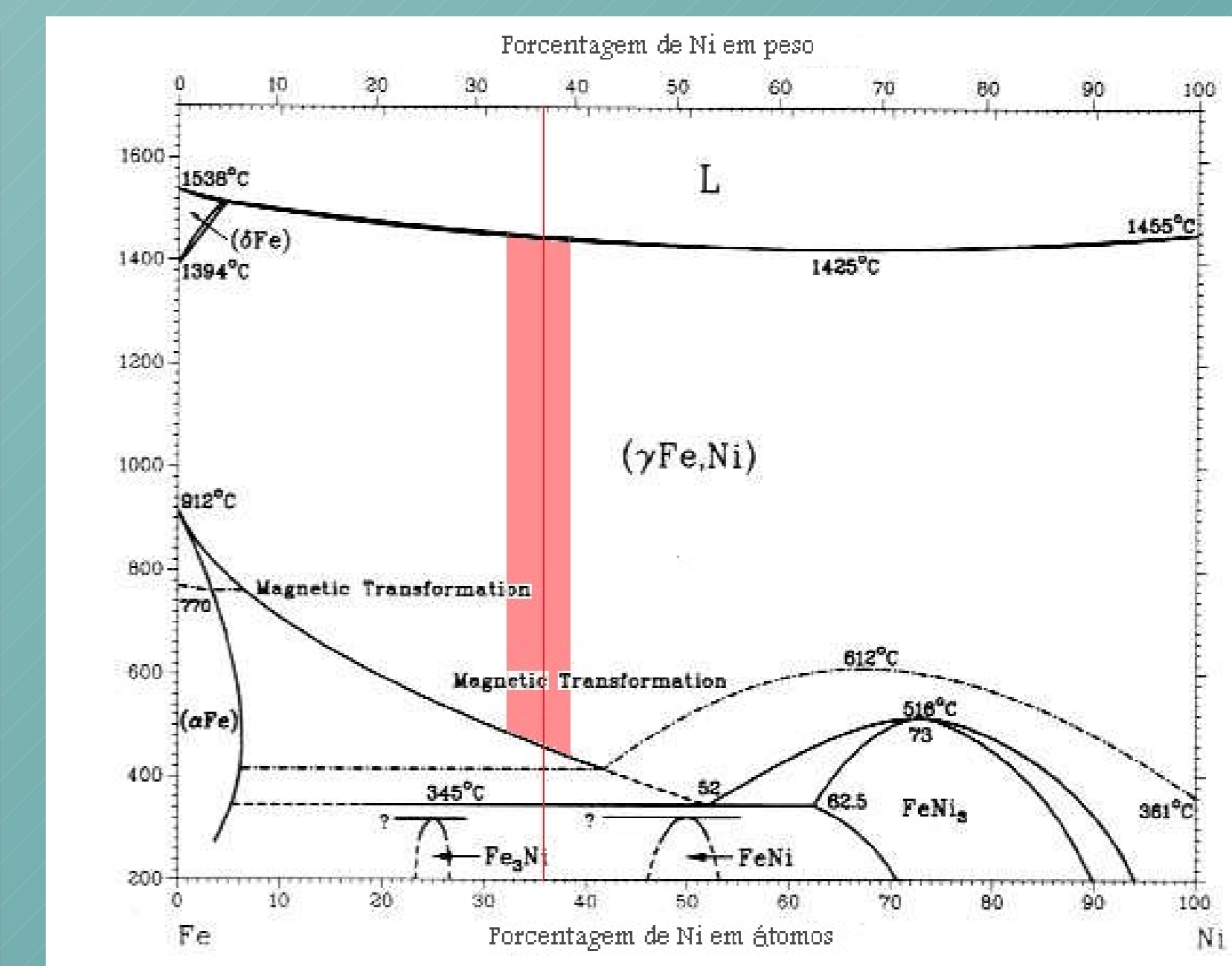


Figura 2: Diagrama de fase da liga intermetálica Fe-Ni. A região que apresenta efeito Invar é mostrada em vermelho e a liga usada é mostrada pela reta.

Resultados e Discussão

Abaixo é exibido um difratograma em temperatura ambiente da amostra e um perfil com vários picos retirados de difratogramas em temperatura:

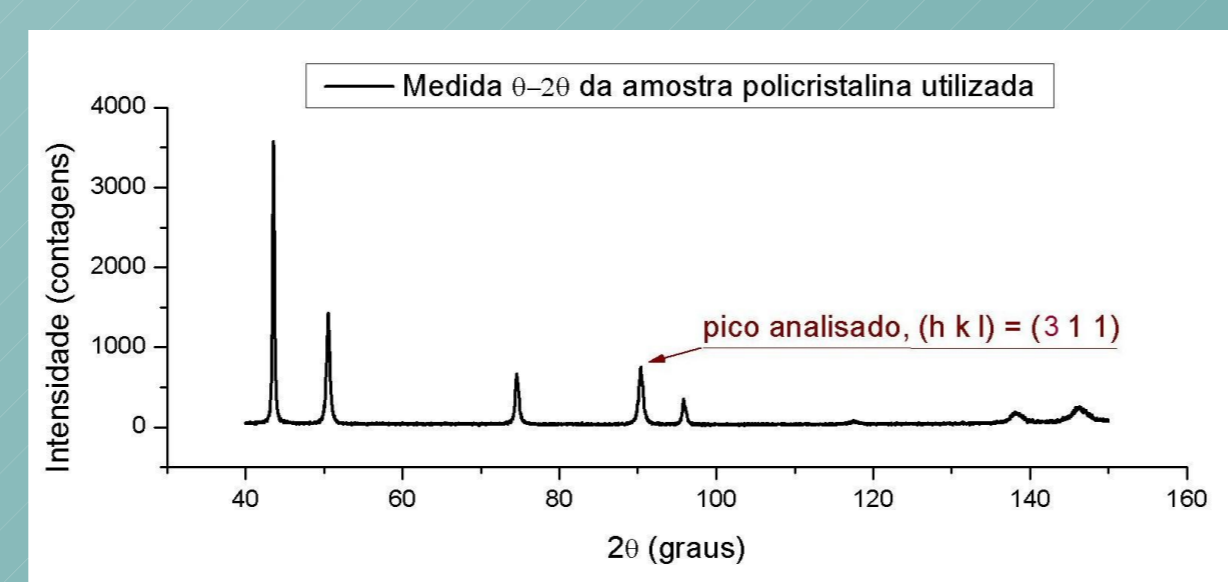


Figura 4: Difratograma da amostra em temperatura ambiente

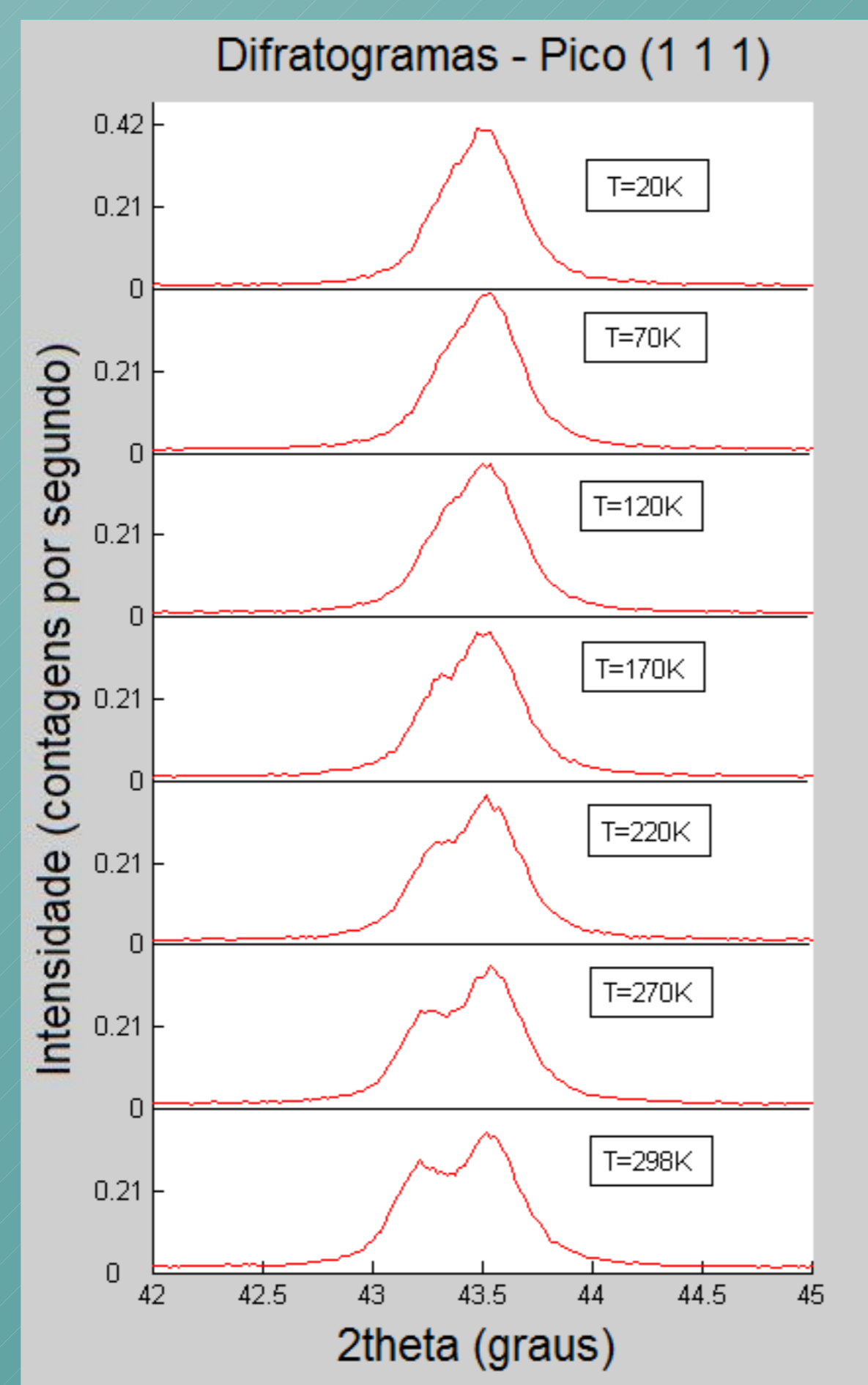


Figura 5: Difratogramas da amostra em várias temperaturas mostrando o pico (1 1 1), o mais intenso

No perfil de temperatura ao lado, podemos observar uma duplicação do pico com o aumento da temperatura, após alguns estudos, percebemos que o feixe estava incidindo sobre o porta-amostra, feito de Cobre, e que o difratograma desse material é quase igual ao da liga trabalhada. Ou seja, os picos medidos são uma soma entre os picos de difração do Cobre e da liga FeNi. Para contornarmos esse problema trabalhamos com o pico (3 1 1), onde a separação entre os picos era maior e para achar o máximo dos mesmos interpolamos somas de gaussianas.

Conclusões

Os resultados obtidos nos cálculos são mostrados nas figuras 4 e 5. Além disso, na figura 6 é mostrado um gráfico encontrado em [2] que exhibe o coeficiente de expansão térmica para o mesmo composto:

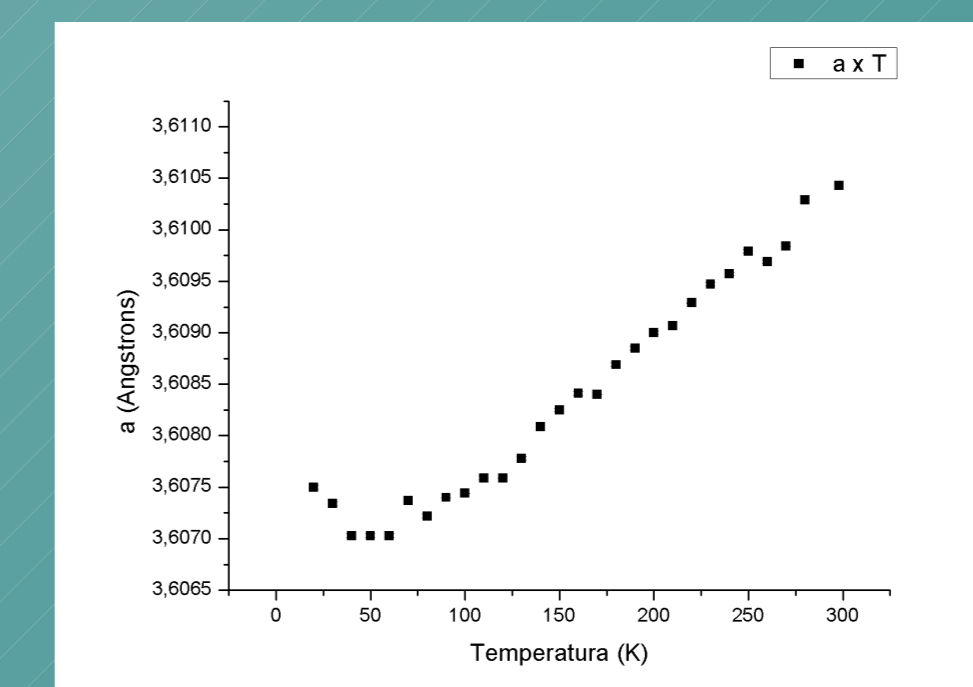


Figura 6: Cálculo do parâmetro de rede da amostra para várias temperaturas.

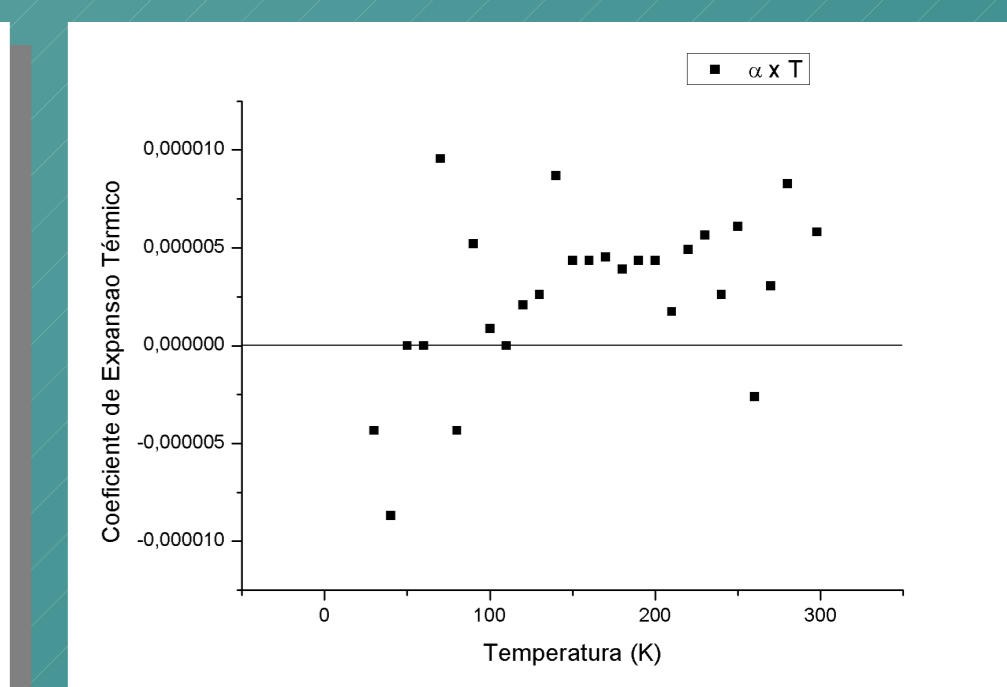


Figura 7: Cálculo do coeficiente de expansão térmica para várias temperaturas

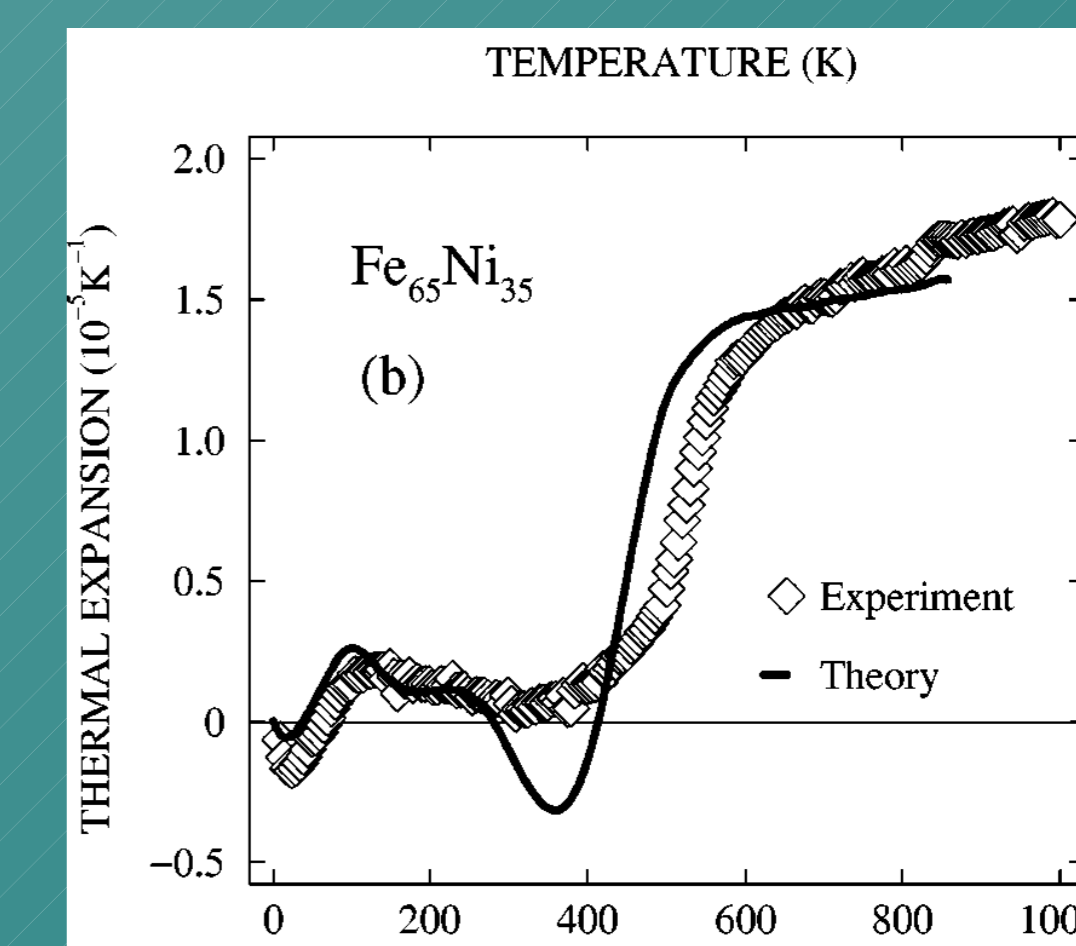


Figura 8: Coeficiente de expansão térmica para liga de FeNi que apresenta efeito Invar

A partir destes gráficos concluímos que a amostra apresentava o efeito Invar. Apesar da grande variação do coeficiente de expansão térmica, seu valor médio concorda com o valor encontrado na literatura [2]. Concluímos também que o método mais eficiente para um estudo experimental como este é a difração de raios X, pois poucos métodos tem definição suficiente para detectar um fenômeno tão sutil.