

Questões

O nitreto de titânio é um composto metal-cerâmico com estequiometria TiN. Sua estrutura cristalina é a do NaCl, ou seja, ela é composta por duas sub-redes com simetria cúbica de faces centradas (CFC) interpenetradas, uma ocupada por titânio e a outra ocupada por nitrogênio. A geometria da estrutura cristalina do TiN está representada na Figura 1. O nitreto de titânio tem muitos usos na engenharia, mas recentemente seu uso como barreira protetora de zircalloy contra a oxidação por vapor d'água em ambientes nucleares durante acidentes severos (causados por perda de líquido refrigerante) foi proposto. Como parte de um esforço para investigar a resistência ao dano por irradiação, filmes finos de TiN com espessura $1,0 \times 10^{-5}$ cm foram irradiados com um feixe de Xe^+ com energia inicial $E_i = 134$ keV, com fluências φ até $6,7 \times 10^{15}$ ions cm^{-2} . Com base nessas informações (e outras que ainda serão dadas), resolva:

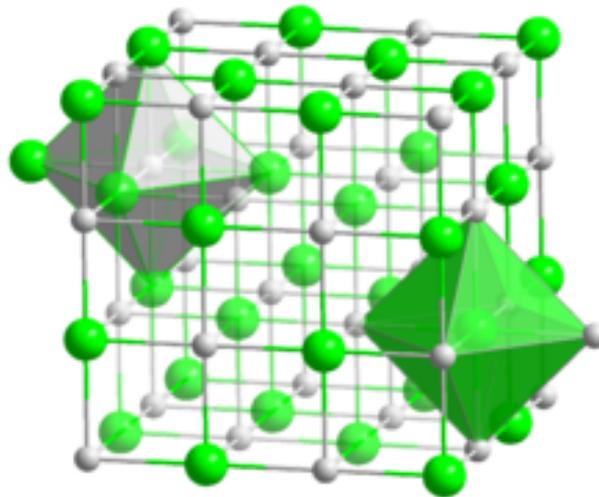


Figura 1: Estrutura cristalina do TiN, apresentando os poliedros de coordenação do Ti e do N.

1. Assumindo que o PKA pode ser tanto um átomo de Ti quanto um átomo de N, estime a máxima energia de ricochete (energia cinética transferida na colisão elástica com o ion de xenônio) que pode potencialmente ser transferida para o PKA em cada caso (indique para que ângulo de espalhamento do PKA essa energia será transferida) e interprete o resultado obtido em termo da severidade do dano potencial que pode ser obtido em cada tipo de PKA (vale 2,0 pontos)
2. Assumindo que vale o modelo de Kinchin-Pease (KP), determine o número médio de átomos deslocados por cada PKA determinado na questão 1, considerando por simplicidade que um PKA de N irá deslocar exclusivamente átomos de Ti (e vice versa, ou seja, um PKA

de Ti irá deslocar apenas átomos de N) e reavalie sua decisão da questão 1, quanto a qual PKA tem mais potencial de produzir dano. (vale 2,0 pontos)

- 3 . Focalização: Determine o ângulo crítico de focalização para um espalhamento produzido por um PKA de Ti na direção [100] da estrutura do TiN e compare com o ângulo crítico para focalização do mesmo PKA ao longo da direção [110], qual é mais provável de ocorrer (note que em cada direção o átomo espalhado irá incidir sobre um alvo diferente)? (vale 2,0 pontos)
- 4 . Uma simulação usando o SRIM (com um modelo mais sofisticado que Kinchin-Pease) resultou, para um único ion Xe^+ de 134 keV incidente, em 1355 deslocamentos, com 35 reposições, gerando um total de 1320 lacunas e 1347 intersticiais, compare esse resultado para a cascata de dano gerada na simulação com os resultados que você obteve nas questões 1 e 2 e discuta (vale 2,0 pontos)
- 5 . O experimento descrito foi executado em três tempos diferentes, resultando em fluências totais (ϕ) de $9,5 \times 10^{14}$ ions cm^{-2} ; $2,9 \times 10^{15}$ ions cm^{-2} e $6,7 \times 10^{15}$ ions cm^{-2} . Estime o dano em dpa (deslocamentos por átomo) correspondente a cada um dos três casos (vale 2,0 ponto)

Dados

- $Z_{\text{Ti}} = 22$, $Z_{\text{N}} = 7$, $Z_{\text{Xe}} = 51$, $A_{\text{Ti}} = 47,867$, $A_{\text{N}} = 14,007$, $A_{\text{Xe}} = 131,29$.
- $E_d(\text{Ti}) = 40$ eV, $E_d(\text{N}) = 28$ eV, nos dois casos assuma que E_c é maior que a máxima energia do PKA.
- Parâmetro de rede do TiN: $a_0 = 0,4235$ nm.
- Raios atômicos: $r_{\text{Ti}} = 0,140$ nm, $r_{\text{N}} = 0,065$ nm.
- densidade do TiN: $5,4$ g cm^{-3} .
- massa molar do TiN: $61,874$ g mol^{-1}
- número de Avogrado: $N_A = 6,022 \times 10^{23}$.

Formulário

- Energia cinética transferida na colisão elástica de um projétil de massa M sobre um alvo de massa m (ϕ é o ângulo de espalhamento do alvo):

$$T = \frac{\gamma E_i}{2} (1 - \cos \phi) \quad (1)$$

com

$$\gamma = \frac{4mM}{(m+M)^2} \quad (2)$$

- Kinchin - Pease (no intervalo $2E_d \leq T \leq E_c$), $\bar{\nu}$ é o número médio de deslocamentos produzidos:

$$\bar{\nu}(T) = \frac{T}{2E_d} \quad (3)$$

- Ângulo crítico de focalização (θ_c , com $D =$ distância interatômica na direção cristalográfica):

$$\theta_c = \frac{D}{4R} \quad (4)$$

- Dano total produzido:

$$dpa \approx \frac{0,4\phi E_T}{NRE_d} \quad (5)$$

assuma que $0,4\frac{E_T}{E_d} \approx 970$, R é a espessura do filme e N é o número de átomos por cm^3 , lembrando que a célula primitiva do TiN é composta por dois átomos.