

## Questões

O alumineto de níquel ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ) é um composto intermetálico que tem excelentes propriedades mecânicas a altas temperaturas (o limite de escoamento aumenta com a temperatura, até uma temperatura de cerca de 973K) tornando esse material interessante para o uso em aplicações que envolvam essas temperatura elevadas, dentre as quais alguns dos projetos de reatores nucleares de geração IV. O alumineto de níquel pode ser usado como material monolítico, ou como fase de reforço em superligas de níquel (nesses materiais esse composto é conhecido como fase  $\gamma'$ ). A Figura 1 apresenta a estrutura ideal do composto  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Nota-se que o composto corresponde a uma reticulado CFC com dois subreticulados, um ocupado por níquel (chamado de I), e o outro ocupado por alumínio (chamado de II). Os defeitos puntiformes possíveis nesse composto correspondem a:

$V_{Al}$  Lacunas no subreticulado do alumínio

$V_{Ni}$  Lacunas no subreticulado do níquel

$Al_{Ni}$  Átomo de antisítio (alumínio) no subreticulado do níquel

$Ni_{Al}$  Átomo de antisítio (níquel) no subreticulado do alumínio

$I_{Al}$  Intersticial de alumínio

$I_{Ni}$  Intersticial de níquel

Apesar do composto ser definido por sua estrutura estequiométrica, ele pode ser encontrado em outras composições, a variação da composição ideal é acomodada pela introdução de defeitos de antisítio. Define-se o parâmetro de ordem como:

$$\eta_{L1_2} = p_{Ni}^I - p_{Ni}^{II} \quad (1)$$

onde  $p_{Ni}^{I,II}$  é a probabilidade de se encontrar um átomo de níquel no reticulado especificado. Essa quantidade varia entre 1 para o composto na estequiometria ideal e 0 para uma estrutura completamente desordenada. O parâmetro de ordem pode variar por desvios da composição em relação à composição estequiométrica e pela variação da temperatura, tendendo a diminuir com o aumento da temperatura.

Recentemente Voskoboinikov<sup>1</sup> publicou um artigo em que relata resultados de simulações por dinâmica molecular de danos ocasionados por PKAs de níquel e de alumínio com diferentes energias iniciais, em diferentes temperaturas. Iremos usar esse artigo para responder as questões.

<sup>1</sup>R. Voskoboinikov "MD simulations of primary damage formation in  $L1_2$   $\text{Ni}_3\text{Al}$  intermetallics" *J. Nucl. Mater.* **522** (2019) 123 – 135.

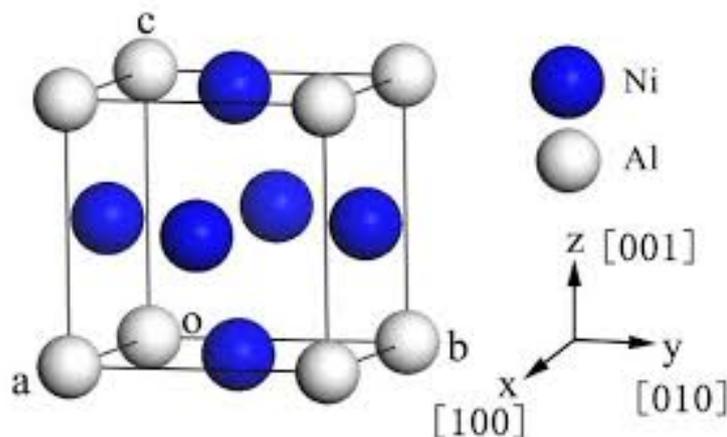


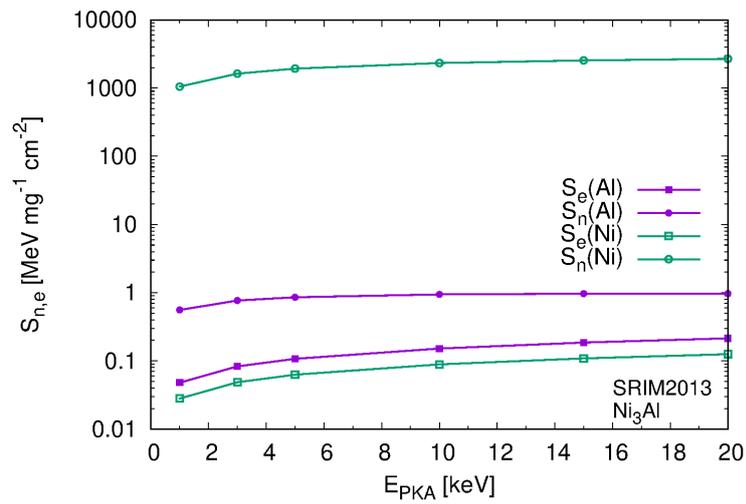
Figura 1: Estrutura cristalina do  $\text{Ni}_3\text{Al}$  estequiométrico.

1. Primeiramente o autor faz uma simulação usando um código de simulação de cascatas de dano, chamado de SRIM2013, para determinar valores para os poderes de frenagem eletrônico ( $S_e$ ) e elástico ( $S_n$ ) e para determinar os alcances ( $R$ ) para as duas espécies atômicas do composto. Os resultados se encontram nas Figuras 2a e 2b.

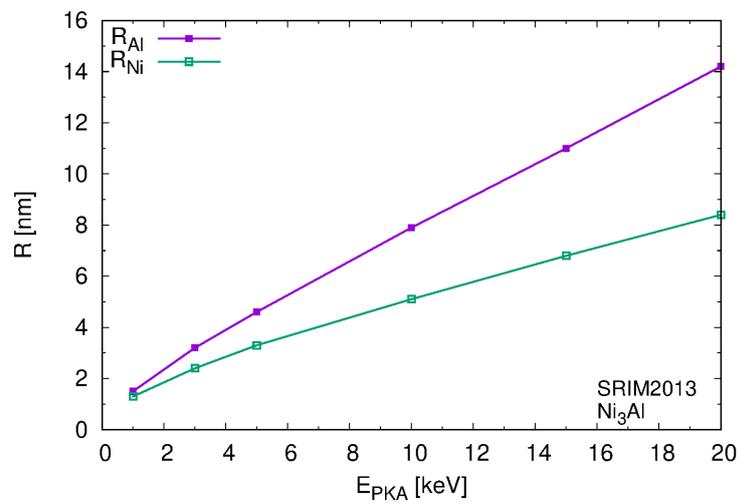
Com base nessas informações e nos dados que serão descritos no final desses enunciados, responda:

- a. Considerando a expressão do modelo que prevê o valor do poder de frenagem elástico (vide o Formulário), discuta a enorme diferença (ordens de grandeza) que há entre o espalhamento de níquel e o espalhamento de alumínio nesse composto<sup>2</sup> (vale 0,5 ponto)
  - b. O autor usa esses resultados para concluir que pode ignorar o efeito do poder de frenagem eletrônica no caso do espalhamento de níquel, enquanto que, em princípio, deveria considerar esse efeito no caso do alumínio, por quê ele pode fazer isso? (vale 1,0 ponto)
  - c. Nota-se que essas diferenças do poder de frenagem total levam a alcances bem diferentes para as duas espécies atômicas, discuta a implicação desse resultado para o dano de radiação no composto (vale 1,0 ponto)
2. A Figura 3 mostra um resultado típico de uma simulação realizada pelo autor, descreva os eventos que ocorrem (incluindo os tempos típicos) durante a geração dessa cascata de dano, iniciada por um PKA de alumínio com energia de 20 keV, e qual seu resultado sobre a estrutura de defeitos produzida, qual é o defeito mais frequente? (vale 2,5 pontos)
  3. O autor inicia suas simulação ao longo de direções  $\langle 123 \rangle$  afirmando que o objetivo é "reduzir a probabilidade de ocorrência dos fenômenos de canalização e de focalização e

<sup>2</sup>Assuma por simplicidade que tanto o níquel quanto o alumínio encontram apenas níquel durante o espalhamento.



(a)



(b)

Figura 2: Poderes de frenagem (a) e alcances (b) para as duas espécies atômicas do composto  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , de acordo com o código SRIM2013.

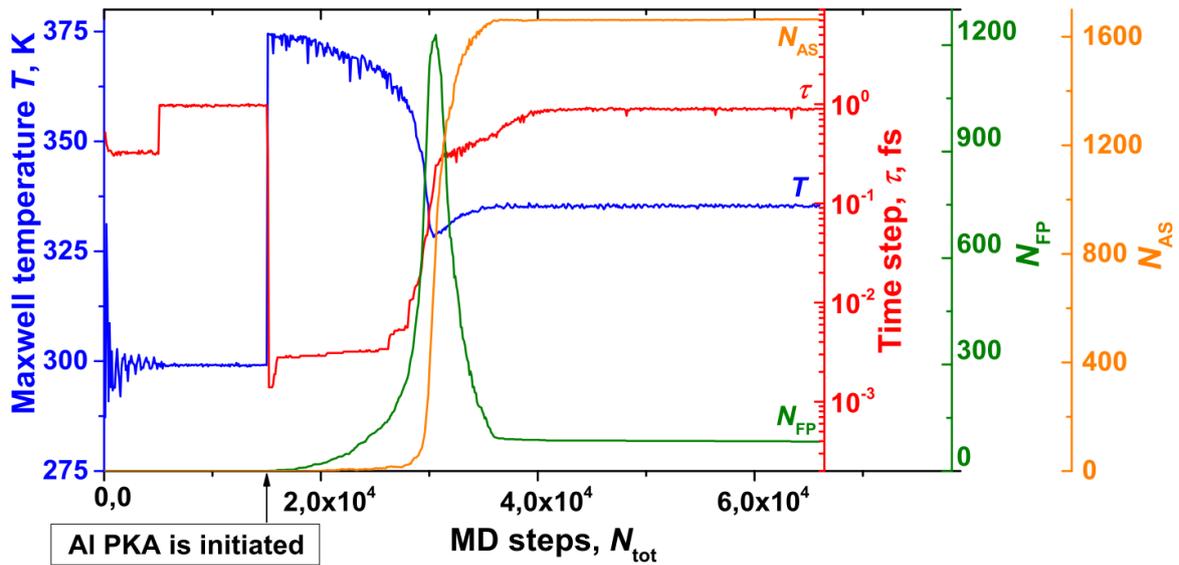


Figura 3: Resultado de uma simulação de MD típica, essa iniciada por uma PKA de Al com energia 20 keV.  $T$ : temperatura do bloco,  $N_{FP}$ : número de pares de Frenkel,  $N_{AS}$ : número de defeitos de anti-sítio.

*imitar uma distribuição isotrópica e aleatória, no espaço e no tempo, de PKAs.*<sup>3</sup>. Interprete essa afirmação e a explique (vale 2,5 pontos).

- 4 . A Figura 4 mostra o formato das cascatas de dano obtidas com PKAs de Al e de Ni com energia de 20 keV. O autor argumenta que esses formatos são ditados pelo poder de frenagem total. O níquel produziria cascatas mais densas, enquanto que o alumínio produziria cascatas mais dispersas, orientadas ao longo da trajetória do PKA original, explique como o poder de frenagem total poderia produzir esse efeito (vale 0,5 ponto).
- 5 . Os resultados do autor indicam que o número médio de pares de Frenkel resultantes da cascata de dano segue uma lei de potência na forma:

$$N_{FP} = A(T) [E_{PKA}]^m \quad (2)$$

onde  $m = 0.87$  e  $0.85$  respectivamente para PKAs de Al e de Ni, já a constante  $A(T)$  é dada na Tabela 1.

A Figura 5 apresenta a fração de *clusters* formados nas cascatas de dano, em função da temperatura. Já a Figura 6 mostra a evolução do número médio de átomos de antisítio produzidos por cascata de dano.

<sup>3</sup>Traduzido livremente do original.

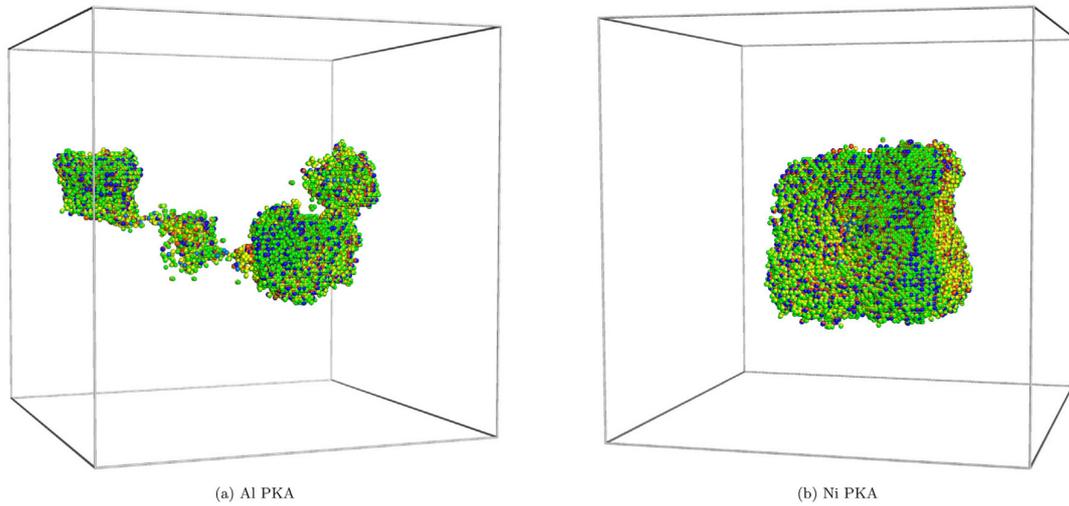
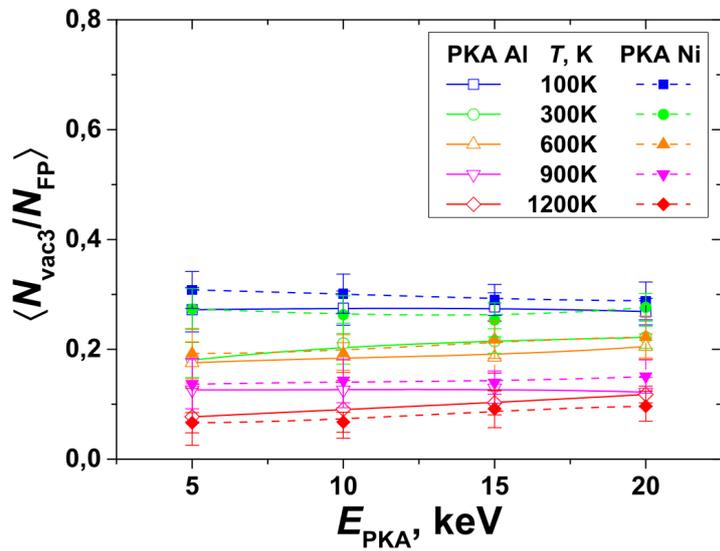


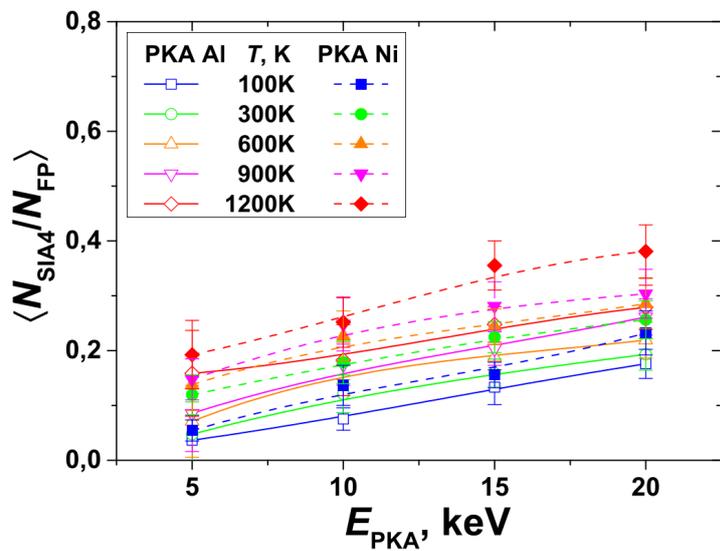
Figura 4: Formatos de cascata de dano produzidas por PKAs de (a) Al e (b) Ni, com energia de 20 keV.

Tabela 1: Constante da lei de potência para a produção de pares de Frenkel no composto

T( K)	100	300	600	900	1200
PKA Al	5,2	4,9	4,4	3,7	3,2
PKA Ni	5,0	4,3	3,6	2,9	2,4



(a)



(b)

Figura 5: Fração de defeitos organizados na forma de *clusters* em função da energia do PKA e da temperatura: (a) - *clusters* de lacunas (com três ou mais lacunas) e (b) - *clusters* de intersticiais (com quatro ou mais intersticiais).

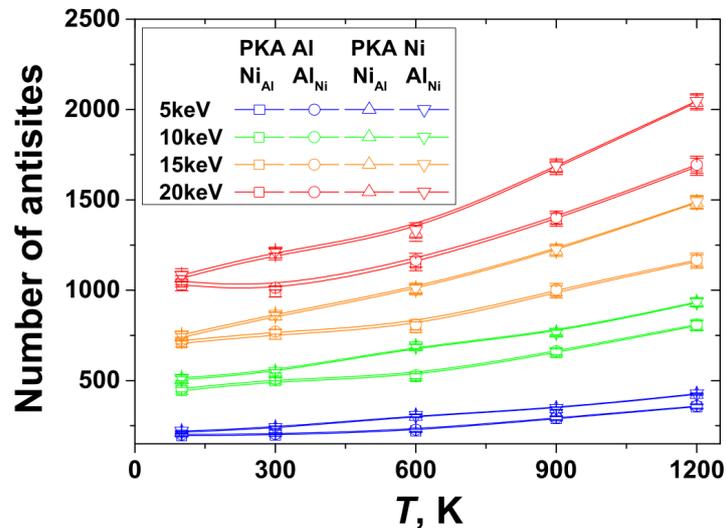


Figura 6: Evolução do número médio de átomos de antisítio por cascata de dano simulada em função da energia do PKA e da temperatura.

Com base nessas informações, para PKAs de 20 keV em temperatura  $T = 1200$  °C, responda:

- Estime o número de lacunas e intersticiais isolados, ou seja, que não estão organizados como *clusters*. (vale 0,5 ponto)
- Discuta o que o resultado do item anterior implica para a difusividade do composto, assumindo por simplicidade que defeitos organizados em *clusters* são imóveis (vale 0,5 ponto)
- Compare o número total de lacunas e de intersticiais com o número de átomos de antisítio. Por quê a diferença de número de defeitos é tão grande? (vale 0,5 ponto)
- O que se espera para o parâmetro de ordem do composto com o progresso do dano por irradiação? (vale 0,5 ponto)

## Dados

- $Z_{Ni} = 28$ ,  $Z_{Al} = 13$ ,  $A_{Ni} = 58,6934$ ,  $A_{Al} = 26,9815386$ .
- $E_d(Ni) = 23 \pm 2$  eV,  $E_d(Al) = 16 \pm 3$  eV, nos dois casos assuma que  $E_c$  é maior que a máxima energia do PKA.
- Parâmetro de rede do  $Ni_3Al$  a 300 °C:  $a_0 = 0,35739$  nm.
- Parâmetro de rede do  $Ni_3Al$  a 1200 °C:  $a_0 = 0,3614$  nm.

- Raios atômicos:  $r_{Ni} = 0,124 \text{ nm}$ ,  $r_{Al} = 0,143 \text{ nm}$ .
- Raio de Bohr:  $a_B = 5.29 \times 10^{-2} \text{ nm}$
- Energia de Rydberg:  $E_R = 13,6 \text{ eV}$

## Formulário

- Poder de frenagem elástico

$$S_n(E_i) = \frac{4\pi (Z_1 Z_2)^2 a_B^2 E_R^2}{E_i} \ln \frac{a^2 E_i^2}{4a_B^2 E_R^2 (Z_1 Z_2)^2} \quad (3)$$

- Raio característico da órbita

$$a = \frac{a_B}{(Z_1 Z_2)^{\frac{1}{6}}} \quad (4)$$

- alcances

$$R = \frac{4E_i}{\pi^2 a^2 \gamma E_a} \quad (E_i \leq E_a) \quad (5)$$

com

$$\gamma = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (6)$$

sendo  $E_a$  o coeficiente do potencial do tipo lei de potência para o níquel