

Modelagem da estrutura atômica de ligas amorfas CoNb1-x produzidas por mecano-síntese usando difração de raios x e método Monte Carlo Reverso

Sérgio Michielon de Souza (1), J.C. de Lima (1), T.A. Grandi (1), C.E.M. Campos (1), D.M. Trichês (1), T.O. Almeida (1), A.R. Jerônimo (1)
(1) UFSC

O Brasil é dos países que detém as maiores reservas de nióbio do mundo. Por esta razão pesquisas devem ser realizada visando desenvolver novas ligas á base desse metal. Atualmente, seu uso mais importante é como elemento de liga para melhoramento das propriedades de produtos á base de aço, em particular aqueles usados na indústria automobilística, aeronáutica e de transporte de gás sob alta pressão. Mais recentemente, na área médica, ligas supercondutoras de nióbio-titânio vêm sendo usadas na fabricação de magnetos para tomógrafos de ressonância magnética e, também em outras áreas como cerâmicas eletrônicas e lentes para câmeras. As técnicas usadas para a produção de ligas á base de nióbio são aquelas usando fusão. Mais recentemente, mostramos que ligas binárias contendo nióbio, nas fases cristalina e amorfa, podem ser produzidas usando a técnica mecano-síntese. Para ligas amorfas, é bem conhecido que suas propriedades dependem basicamente da distribuição dos primeiros vizinhos em torno do nióbio e do segundo elemento. Assim, um conhecimento de suas estruturas atômicas se faz necessário para aplicações tecnológicas. Neste trabalho, apresentamos resultados sobre a modelagem da estrutura atômica das ligas binárias amorfas Co₂₅Nb₇₅, Co₄₁Nb₅₉ e Co₆₂Nb₃₈ produzidas por mecano-síntese. A modelagem foi realizada a partir dos fatores de estrutura S(K) derivados de padrões de difração de raios x e que foram usados como dados de entrada no método Monte Carlo Reverso (RMC). Dos resultados obtidos foi inferido que a composição Co₄₁Nb₅₉ é que possui a estrutura amorfa com maior compactação. Uma comparação das estruturas atômicas amorfas com aquelas previstas pelo modelo de empilhamento aleatório de esferas rígidas para misturas de cobalto e nióbio, com composições iguais a das ligas, mostraram uma grande semelhança.

Palavras-Chave:

mecano-síntese, fator de estrutura, números de coordenação, amorfos