

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1979

01.79.11

CNEA-NT 12/79

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
DIRECCION DE INVESTIGACION Y DESARROLLO

SOLIDOS 79

Contribuciones a una Reunión
Centro Atómico Bariloche
15 - 24 de enero de 1979

BUENOS AIRES

1979

INDICE

	pag.
Introducción	1
Lista de Participantes	5
Programa de la Reunión	9
Título de las exposiciones	10
Síntesis de las presentaciones	11
Relevamiento de equipos e instrumental	57

En el período comprendido entre el 15 y el 24 de Enero de 1979, se realizó en el Centro Atómico Bariloche una reunión de investigadores dedicados al estudio de las propiedades básicas del estado sólido, llamada "Sólidos 79". Participaron de la misma 45 investigadores, pertenecientes a la Comisión Nacional de Energía Atómica, al Instituto de Matemática, Astronomía y Física de la Universidad de Córdoba, a las Facultades de Ciencias Exactas y Naturales y de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires, a la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad de La Plata, a la Comisión Nacional de Investigaciones Espaciales, al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas y a la Fundación Sauberán.

Los objetivos principales de "Sólidos 79" fueron:

- a) intercambiar información acerca de los progresos que se realizan en las distintas áreas de trabajo.
- b) establecer, dentro de lo posible, planes de investigación afines que permitan una estrecha colaboración entre varios grupos de trabajo.
- c) promover el máximo aprovechamiento de equipos e instalaciones existentes, evitando duplicación de instrumental, cuando ésta sea innecesaria.

La reunión se desarrolló de acuerdo al siguiente esquema: se realizaron dos presentaciones por la mañana y dos por la tarde, dedicadas a la exposición de las líneas de trabajo de los distintos grupos. A cada exposición siguió un período de discusión. Estas conferencias fueron de nivel general, con la intención de informar a los demás participantes acerca de las características de las investigaciones realizadas. Asimismo hubo una sesión referente a la utilización por parte de los solidistas del acelerador TANDAR, una sesión dedicada al intercambio de información acerca de las facilidades experimentales existentes en los distintos laboratorios, en base a material recopilado por el Comité Organizador, visitas a los laboratorios del CAB y discusiones informales.

En este informe se incluye una lista de participantes, el programa detallado, resúmenes de las exposiciones realizadas y un detalle de las diferentes facilidades experimentales existentes en los distintos laboratorios.

Los temas tratados durante la reunión cubrieron un amplio espectro: transiciones de fase, sistemas desordenados, defectos en cristales, valencia intermedia, dinámica de redes, propiedades físicas de metales y aleaciones de interés nuclear, superconductividad, resonancias magnéticas, mi-

croscopía electrónica, espectroscopía vibracional, difracción de rayos X, correlaciones angulares perturbadas, y técnicas de bajas temperaturas.

En líneas generales, se cumplieron los objetivos propuestos de manera altamente satisfactoria; el ambiente de trabajo, y la permanente comunicación entre los participantes, fueron factores que permitieron un intercambio fluido de información, contribuyendo fundamentalmente al éxito de la reunión.

La sesión de clausura fue dedicada al análisis de la reunión y a la discusión de diversos temas de interés para la comunidad de solidistas.

Como primer punto, se consideró el aislamiento en que se encuentran los solidistas argentinos agravado por la carencia de un delegado al Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido (SLAFES), cuya sexta reunión tuvo lugar del 5 al 16 de Febrero de 1979. En relación a este punto, se decidió encomendar a Horacio Ceva, participante en la VI SLAFES, asumir esa representación. (Cabe agregar que considerada esta designación en el VI SLAFES, el Comité Regional del mismo decidió que el Dr. Ceva participe de las reuniones que realice, en carácter de invitado, hasta tanto se resuelva la situación del representante argentino).

Luego, se hizo el balance de la reunión, y se trató la organización de futuros encuentros.

Fue opinión de los participantes que esta reunión, la primera en su tipo efectuada en el país, fue muy exitosa, cumpliendo ampliamente con sus objetivos. Dentro de este contexto, se consideró algo larga su duración, teniendo en cuenta que no se realizaron cursillos; asimismo se consideró que las discusiones científicas no relacionadas directamente con las exposiciones ("discusiones informales"), debieron ser organizadas y no dejadas libradas sólo a la iniciativa de los participantes; además haberles dedicado mayor tiempo en la programación. Se acordó, también, la elaboración del presente informe por parte del Comité Organizador.

La discusión acerca de una nueva reunión de solidistas constituyó la parte central de la sesión. Luego de un extenso intercambio

de opiniones, se establecieron las siguientes características para las próximas reuniones:

1. Es conveniente, en general, repetir estas reuniones cada dos años. Además, deben realizarse preferentemente en los años en que no se realicen SLAFES. Con respecto a la próxima, específicamente, se consideró oportuno no esperar esos dos años, a fin de establecer la habitualidad de las mismas.
2. Se concordó en que se hiciese una vez más en el Centro Atómico Bariloche, y luego se alternase con otros sitios (Capital Federal, Córdoba, etc.). Esto se fundamentó en el hecho de que el CAB posee un buen equipamiento experimental, y las restantes facilidades (alojamiento, biblioteca) de infraestructura. Se fijó como fecha Julio de 1980.
3. Se designó un Comité Organizador, formado por Francisco de la Cruz (CAB, CNEA), Horacio Ceva (SC, CNEA) y Ricardo Migoni (CAC, CNEA).
4. Con respecto a la modalidad, se decidió que considerándose cumplido el propósito de información general de la presente reunión no debe repetirse, en consecuencia, de esta manera. Las pautas que se dan para la organización de la próxima reunión son:
 - i) aproximadamente 10 exposiciones de unos 30 minutos, dedicadas a la "puesta al día" de las investigaciones de los distintos grupos, con un carácter más específico que el de esta reunión. En reuniones posteriores se intentará ir rotando los expositores y los temas, en forma tal que en un período razonable todas las líneas de trabajo se vean adecuadamente representadas en estos informes
 - ii) programar un amplio tiempo para discusiones
 - iii) implementar al menos una de las siguientes alternativas:
 - a) organizar un panel con expertos locales y extranjeros, que analicen el grado de desarrollo de la física del Sólido en nuestro país, sugiriendo líneas promisorias para un futuro desarrollo de la misma;
 - b) cursillos, con expertos locales o extranjeros
 - iv) hacer una encuesta entre la comunidad de solidistas, en relación con los posibles cursillos
 - v) gestionar financiación de diversos organismos, nacionales y extranjeros, tales como CONICET, SECYT, OEA, etc.

Con respecto a la financiación de "Sólidos 79", cabe destacar que no se requirió financiamiento específico, salvo el pago de viajes y viáticos, que en casi todos los casos estuvo a cargo de las instituciones donde desarrollan sus actividades los distintos investigadores.

Los gastos de los miembros de la Carrera del Investigador Científico fueron solventados por el CONICET. La carencia de financiación externa, sin embargo, provocó la inasistencia de algunas personas que habían manifestado su intención de concurrir, pero que carecieron de apoyo económico de sus instituciones, por diversas razones.

Los miembros del Comité Organizador desean expresar su agradecimiento a las autoridades y miembros del Centro Atómico Bariloche por la forma cordial y eficiente con que colaboraron al buen desarrollo de la reunión.

Buenos Aires, Julio de 1979
María A.R. de Benyacar
Hernán Bonadeo
Horacio Ceva

PARTICIPANTES, E INSTITUCIONES EN LAS QUE TRABAJAN:

AHLERS, MANFRED	CNEA (CAB)
ALASCIO, BLAS	CNEA (CAB)
ALLUB, ROBERTO	CNEA (CAB)
ARIAS, DELIA	CNEA (CAC)
BADLER, CELIA S. DE	CNEA (SC)
BAGGIO, RICARDO	CNEA (SC)
BENYACAR, MARIA A.R. DE	CNEA (SC)
BONADEO, HERNAN	CNEA (SC)
BRUNETTI, ALDO	IMAF, UNC
BURGOS, ENRIQUE	CNEA (SC)
CEVA, HORACIO	CNEA (SC)
COHAN, NORA	CNEA (SC)
DE LA CRUZ, FRANCISCO	CNEA (CAB)
DE LA CRUZ, MARIA ELENA	CNEA (CAB)
DUSSEL, HILDA L. DE	CNEA (SC)
DYMENT, FANNY	CNEA (CAC)
FAERMAN, CARLOS	
FAINSTEIN, CARLOS	CNEA (CAB)
HALAC, EMILIA B.	CNEA (SC)
HARRIAGUE, SANTIAGO	CNEA (CAC)
HERNANDO, JORGE	CNEA (SC)
HERNANDO, ZULEMA G. DE	CNEA (SC)
IPOHORSKI, MIGUEL	CNEA (CAC)
KOWALEWSKI, VALDEMAR	FCEN, UBA
KURLAT, DAVID	FI, UBA

KURLAT, MARTA R. DE	FI , UBA
LEVI, LAURA	CNEA (SC)
LOPEZ, ARTURO	CNEA (CAB)
LOPEZ GARCIA, ALBERTO	FCE, UNLP
LUZURIAGA, JAVIER	CNEA, (CAB)
MANGHI, ESTELA	CNEA (SC)
MARTINEZ, ERNESTO	CNEA (CAB)
MASSIDDA, VICTOR	CNEA (SC)
MASSIDDA, PILAR C. DE	FI, UBA
MAZZAFERRO, JORGE	CNEA (CAB)
MIGONI, RICARDO	CNEA (CAC)
PERAZZO, PATRICIA K. DE	CNEA (SC)
POMPOSIELLO, MARIA CRISTINA	CNIE
POVOLO, FRANCISCO	CNEA (CAC)
PRATO, DOMINGO	IMAF, UNC
SALVA, HORACIO	CNEA (CAB)
SAVINO, EDUARDO	CNEA (CAC)
TRIGUBO, ALICIA B.	CNIE
WAINER, LELIA S. DE	CNEA (SC)
WEISSMAN, MARIANA	CNEA (SC)

DIRECCIONES POSTALES:

CNEA (SC) DIVISION FISICA DEL SOLIDO
CNEA
AVDA DEL LIBERTADOR 8250
1429 CAPITAL FEDERAL
.....

CNEA (CAC) DEPARTAMENTO DE MATERIALES
CNEA
AVDA. DEL LIBERTADOR 8250
1429 CAPITAL FEDERAL
.....

CNEA (CAB)..... CENTRO ATOMICO BARILOCHE
CNEA
BARILOCHE
8400 PROVINCIA DE RIO NEGRO
.....

IMAF IMAF
LAPRIDA 854
5000 CORDOBA
.....

FI, UBA DTO DE FISICA
FACULTAD DE INGENIERIA
PASEO COLON 850
1063 CAPITAL FEDERAL
.....

FCEN, UBA DTO DE FISICA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
PABELLON 1
CIUDAD UNIVERSITARIA
1428 CAPITAL FEDERAL
.....

FCE, UNLP DTO DE FISICA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
CASILLA DE CORREO 67
1900 LA PLATA
.....

CNIE COMISION NACIONAL DE INVESTIGACIONES ESPACIALES
AVDA. MITRE 3100
SAN MIGUEL
PCIA DE BUENOS AIRES
.....

PROGRAMA DE LA REUNION "SOLIDOS 79"

hs.	15	16	17	18	19	22	23
9 a 10.30	RECEPCION	E. SAVINO R. MIGONI	H. CEVA	H. BONADEO	S. HARRIAGUE	N. COHAN Y M. WEISSMANN	M. IPOHORSKI
10.30 a 12.00	B. ALASCIO	F. POVOLO	V. MASSIDDA	A. BRUNETTI	F. DYMENT	D. KURLAT	R. BAGGIO
ALMUERZO							
14.00 a 15.30	A. LOPEZ GARCIA	F. de la CRUZ				M. AHLERS	L. WAINEK E. MANGHI
15.30 a 17.00	C. FAINSTEIN	L. LEVI	INSTRUMENTACION Coordinador: V. KOMALEWSKI	DISCUSIONES INFORMALES y VISITAS A LABORATORIOS	ACELERADOR "TANDAR": PO- SIBLES APLICACI- ONES A FISI- CA DEL SOLIDO. Coordinadora: M. Benyacar	DISCUSIONES INFORMALES y VISITAS A LABORATORIOS	D. ARIAS

TITULO DE LAS EXPOSICIONES

- . AHLERS, M.: "Transformaciones martensíticas en latones".
- . ALASCIO, B.: "Valencia intermedia".
- . ARIAS, D.: "Transiciones de fase en Zircaloy 4".
- . BAGGIO, R.: "Difracción de rayos X en el estudio de sólidos".
- . BONADEO, H.: "Espectroscopía vibracioneal y dinámica reticular de cristales moleculares".
- . BRUNETTI, A.: "Dependencia con la temperatura de la frecuencia de transición y tiempo de relajación spin-red en NQR. Oscilaciones torsionales en cristales moleculares".
- . CEVA, H.: "Grupo de renormalización y transiciones de fase".
- . COHAN, N. y WEISSMANN, M.: "Estados electrónicos de sistemas desordenados".
- . de la CRUZ, F.: "Fenómenos cuánticos en superconductores".
- . DYMENT, F.: "Estudio de difusión y autodifusión de solutos en metales y aleaciones".
- . FAINSTEIN, C.: "Efectos de deformación de la red cristalina".
- . HARRIAGUE, S.: "Comportamiento termo-mecánico de materiales de interés nuclear".
- . IPOHORSKI, M.: "Observación de defectos cristalinos por microscopía electrónica".
- . KURLAT, D.: "Fenómenos de transporte en sistemas desordenados".
- . LEVI, L.: "Problemas de nucleación y cinética de crecimiento de cristales".
- . LOPEZ GARCIA, A.: "Aplicación de la técnica TDPAC al estudio de daños puntuales".
- . MANGHI, E.: "Caracterización de defectos cristalinos por topografía de rayos X".
- . MASSIDA, V.: "Transiciones de fase en ferroeléctricos hidratados".
- . MIGONI, R.: "Dinámica de redes".
- . POVOLO, F.: "Propiedades mecánicas de metales y aleaciones de interés nuclear".
- . SAVINO, E.: "Teoría de defectos en metales".
- . WAINER, L.: "Estudio por microscopía electrónica de materiales ferroeléctricos".

VALENCIA INTERMEDIA: CARACTERIZACION EXPERIMENTAL E INTERPRETACION

Blas Alascio

Centro Atómico Bariloche , - CNEA -

Se describen las propiedades físicas que se enumeran a continuación de compuestos de valencia intermedia, especialmente aquellos que contienen tierras raras.

- 1) Susceptibilidad magnética estática: Satura a bajas temperaturas sin indicios de orden. A temperaturas más altas toma valores intermedios entre los correspondientes a dos ocupaciones enteras de las capas 4f. Ejemplos: α -Ce , Sm S a 10 Kbar.
- 2) Susceptibilidad magnética dinámica: El espectro de energías de dispersión magnética de neutrones muestra picos quasi-elásticos que se extienden hasta energías del orden de unas décimas de meV. Ejemplos: Ce Pd₃ , Ce_{1-x}Th_x .
- 3) Parámetro de red: Toma valores intermedios entre los que corresponderían a dos valencias características del ion tierra rara. Ejemplo: comparación γ -Ce , α -Ce , α' -Ce.
- 4) Corrimiento isomérico en el espectro Mossbauer: Nuevamente toma valores intermedios entre dos valencias. Ejemplo: compuestos que contienen Eu.
- 5) Espectro de emisión de foto-electrones: En contraposición con espectro Mossbauer muestra claramente una superposición en lugar de corrimiento de los espectros correspondientes a dos valencias. Ejemplo: Sm S a 10 Kbar , Sm_{1-x}Y_x S , Tm Te.

Interpretación: Cada átomo fluctúa con una cierta frecuencia característica entre dos valencias dadas. Si el experimento es rápido (comparado con el período de fluctuación) el resultado es la superposición de los resultados que se obtendrían con una u otra valencia. Ejemplo: XPS. Si por el contrario el experimento es lento, el resultado es un promedio de los resultados que se obtendrían en una u otra valencia. Ejemplo: espectro Mossbauer.

TRANSFORMACIONES DE FASE EN ZIRCALOY-4

Delia Arias

Proyecto Planta Piloto Fabricación de Aleaciones Especiales, - CNEA -

- Se realizó una breve descripción de los distintos procesos metalúrgicos que forman parte de la fabricación de tubos y productos planos de Zircaloy-4.
- El grupo de Evaluación y Apoyo Básico del Proyecto Planta Piloto Fabricación de Aleaciones Especiales tiene, entre otros, como objeto el estudio de distintas propiedades metalúrgicas vinculadas a las etapas de fabricación para lo cual parte de dichos estudios son derivados al Departamento de Materiales y parte son encarados por integrantes de dicho grupo de trabajo.
- En lo que sigue se hará un breve resumen de algunos de los trabajos realizados:
 - i) Estudio de la transformación de fase de alta temperatura en Zircaloy-4 (C.Menoni - D.Arias). Se determinó la temperatura de la transformación $\alpha \rightarrow \alpha + \beta$ con técnicas de resistividad, microscopía óptica electrónica de barrido y microsonda electrónica, siendo su valor de 780°C-790°C en experiencias de enfriamiento y de 810°C-830°C en experiencias de calentamiento.
Se determinó que la temperatura de formación de la 2da. fase precipitada ocurre entre 830°C-840°C.
 - ii) Determinación de la composición de la segunda fase precipitada en Zircaloy-4 (T.Palacios - D.Arias). Utilizando microsonda electrónica se midió la composición de los precipitados en muestras tratadas durante distintos tiempos a distintas temperaturas, siendo la composición: Zr \simeq 33,3% at. y (Cr + Fe) \simeq 66,6% at. en una relación de Cr/Fe que variaba entre 1,4 y 0,4.
 - iii) Análisis de una secuencia de fabricación en chapas de Zircaloy-4 (M.Resta Levi - D.Arias). Se reprodujo en chapas una posible secuencia de fabricación de tubos de Zircaloy-4 a fin de estudiar el efec-

to que los tratamientos termomecánicos tienen en las propiedades estructurales y mecánicas finales.

Trabajos en curso y líneas a desarrollar en Zircaloy-4

- 1) Cinéticas de crecimiento, con o sin deformación de la segunda fase precipitada.
- 2) Estudio de la aleación correspondiente a la segunda fase precipitada.
- 3) Influencia de los distintos tratamientos termomecánicos en el creep.
- 4) Evaluación de distintas etapas en el proceso de fabricación de tubos.
- 5) Influencia de los aleantes en el proceso de recuperación y recristalización.

DIFRACCION DE RAYOS X EN EL ESTUDIO DE SOLIDOS

Ricardo Baggio

División Física del Sólido, - CNEA -

Entre las técnicas de observación de la estructura interna de los sólidos, la difracción de Rayos X sigue siendo la más popular, versátil y económica. Equipos sencillos, de fácil mantenimiento, operables en principio por personal con una mínima capacitación, a la vez que una teoría sencilla para la predicción e interpretación de los resultados, la convirtieron desde hace tiempo en una técnica standard de cualquier laboratorio de Física del Sólido.

Como contribución a la Reunión de Física del Estado Sólido, se dio un somero resumen, ciertamente no exhaustivo, de las posibilidades del método, y del tipo de información extractable de cada una de las experiencias.

Se puntualizó cuáles eran realizables en dependencias de la CNEA (Laboratorios de Rayos X del Departamento de Física y del Departamento de Materiales) con el equipamiento existente, y cuáles requerían sofisticaciones mayores. Entre los primeros se mencionó el análisis del carácter cristalino de una muestra por simple inspección de su diagrama de difracción; orientación de cristales por métodos de cristal fijo y móvil (método de Laue, Weissenberg y Precesión); estudio de la simetría de un cristal, con determinación de su grupo puntual y, eventualmente, espacial; identificación de sustancias por comparación de su diagrama de polvo con las fichas del JCOPS (ex ASTM); medición de parámetros de celda, cálculo de densidades y número de moléculas por celda; estudio de orientación preferencial de granos (textura), tamaño de los dominios de difracción y tensiones residuales; determinación de estructuras.

Por último se hizo una breve reseña sobre las líneas de trabajo del grupo de Rayos X de la División Física del Sólido del Departamento de Física de CNEA (Determinación de estructuras cristalinas y moleculares de compuestos de probado o probable carácter ferroeléctrico), así como del tipo de servicios habitualmente prestados a otros grupos.

1.79.11

ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL Y DINAMICA RETICULAR DE CRISTALES MOLECULARES

Hernán Bonadeo, División Física del Sólido, CNEA y CONICET

Los cristales moleculares se caracterizan por la existencia en la red de grupos de átomos (moléculas o iones poliatómicos) unidos entre sí por fuerzas intramoleculares que son varios ordenes de magnitud mayores que aquellas que unen los grupos entre sí, llamadas intermoleculares. De este modo las moléculas al pasar del estado gaseoso o líquido al cristalino, conservan su identidad, y el campo cristalino puede ser considerado como una perturbación del campo interno.

El espectro de vibración del cristal será entonces bastante parecido al de la molécula aislada, con las siguientes posibles modificaciones: a) las bandas internas (intramoleculares) que aparecen en el rango $400-4000 \text{ cm}^{-1}$ se afinan al perder la estructura vibrorotacional, y por efecto del campo se corren y se desdoblan; b) pueden aparecer bandas previamente prohibidas debido a la pérdida de simetría en el sitio que ocupan las moléculas; c) aparece un grupo de bandas en la región $10-150 \text{ cm}^{-1}$, llamadas externas o reticulares, debidas a translaciones y rotaciones impedidas de las moléculas. Todos estos fenómenos se deben a la existencia de fuerzas intermoleculares y éstas constituyen el objeto fundamental de la dinámica de redes.

Los métodos más comunes para estudiar transiciones vibracionales son ópticos: absorción en el infrarrojo y dispersión Raman. En el primer caso, un fotón es absorbido por la muestra creándose un fonón; la transición es permitida cuando está asociada a un cambio en el momento dipolar. En el segundo, un fotón es dispersado inelásticamente, creándose un fonón; se mide la diferencia de energías entre el fotón incidente y el dispersado, y la transición es permitida cuando está asociada a un cambio en la polarizabilidad. Las dos técnicas son por lo tanto complementarias.

Como la longitud de onda de los fotones es mucho mayor que las dimensiones de la celda unidad, se observan sólo transiciones (a un fonón) para $k = 0$, por eso llamadas ópticamente activas. Para $k \neq 0$ deben utilizarse técnicas de difracción inelástica coherente de neutrones lentos, que tienen momentos comparables a los de los fonones.

Cada estado vibracional tiene simetría definida respecto del grupo espacial del cristal, y lo mismo ocurre para las componentes del momento dipolar y el tensor de polarizabilidades. Las bandas observadas en infrarrojo y Raman tienen entonces propiedades de polarización que dependen de la especie de simetría correspondiente, y mediante experiencias en luz polarizada con monocristales es posible asignarlas a fin de compararlas adecuadamente con cálculos teóricos.

Los cristales moleculares son generalmente muy complejos, y es imposible realizar cálculos partiendo de primeros principios. Sin embargo, modelos semiempíricos simples reproducen con bastante precisión los datos experimentales. Los dos modelos utilizados habitualmente son el de interacción multipolar, que se aplica a cristales iónicos, y el de átomo-átomo no ligado, para moléculas neutras, que es el que nos interesa particularmente. Este modelo fue utilizado primeramente para describir propiedades estáticas -empaquetamiento, calores de sublimación, etc.- y luego expandido a propiedades dinámicas. La interacción entre moléculas, que se supone de a pares, se describe como una suma de interacciones radiales entre átomos no ligados, con una forma funcional del tipo Lennard-Jones o Buckingham, y parámetros semiempíricos que se ajustan en base a propiedades observadas de un conjunto de cristales relacionados entre sí.

En el laboratorio de Espectroscopía Vibracional se realizan investigaciones de carácter experimental, a través de la medición de espectros Raman e infrarrojos, y teóricos con el cálculo de propiedades dinámicas y termodinámicas, refinamiento de parámetros de potencial, y análisis crítico de las diversas aproximaciones utilizadas en los cálculos; por supuesto los dos aspectos están íntimamente relacionados. En los últimos años fueron estudiados en particular benceno y muchos de sus derivados halogenados.

DEPENDENCIA CON LA TEMPERATURA DE LA FRECUENCIA DE TRANSICION Y DEL
TIEMPO DE RELAJACION SPIN-RED EN LA N.Q.R. OSCILACIONES TORSIONALES
EN LOS CRISTALES MOLECULARES

Aldo H. Brunetti

I.M.A.F. (Univ. Nac. de Cba.)

La Resonancia cuadrupolar nuclear (R.C.N.) es una técnica experimental perteneciente a las Resonancias Magnéticas, y consiste en sintonizar el instrumento experimental con una frecuencia natural del sólido proveniente de la interacción del momento cuadrupolar eléctrico del núcleo con el gradiente del campo eléctrico (G.C.E.) que hay en el sitio nuclear producido por las cargas eléctricas externas a él. Como se requiere núcleos que posean momento cuadrupolar eléctrico, éstos deben poseer spin nuclear mayor de $\frac{1}{2}$; y como es necesario un G.C.E., el núcleo se debe encontrar en un sitio que no tenga simetría esférica ni tampoco debe el campo eléctrico fluctuar muy rápidamente, como ocurre en los líquidos, ya que entonces el campo se promediará en el tiempo y su gradiente será nulo. Por lo tanto, la R.C.N. sólo es posible con núcleos con $I > \frac{1}{2}$ y en los sólidos.

En los sólidos moleculares el G.C.E. que vé el núcleo es dado mayormente a las cargas eléctricas de la propia molécula; sin embargo, esta técnica es lo suficientemente sensible para poder observar las diferencias que se producen al modificar las disposiciones relativas de las moléculas y aún observar las variaciones en el G.C.E. que se producen al dilatar o comprimir el cristal por efectos térmicos y de una presión externa.

También las oscilaciones en los sólidos moleculares hacen que el núcleo vea un G.C.E. promediado en el tiempo. Este promedio es modificado con la temperatura, por lo que la frecuencia de resonancia es dependiente de la temperatura.

Las transiciones de la molécula entre sus niveles de energía de oscilación producen fluctuaciones muy rápidas del G.C.E., lo que induce transiciones nucleares entre sus niveles de energía cudrupolar dando lugar

a un mecanismo de relajación nuclear spin-red sumamente efectivo que es también dependiente de la temperatura.

En el I.M.A.F se están estudiando la R.C.N. del ^{35}Cl y del ^{14}N en distintos sólidos moleculares. En particular se está estudiando la dependencia con la temperatura de la frecuencia de resonancia y del tiempo de relajación nuclear spin-red en los bencenos clorados.

Dada la sensibilidad de esta técnica ante pequeñas variaciones del G.C.E. en el sitio nuclear, esta técnica es particularmente útil para el estudio de transiciones de fase sólido-sólido, pudiéndose determinar cambios en la fase cristalina o cambios de fase de segundo orden.

GRUPO DE RENORMALIZACION Y TRANSICIONES DE FASE

Horacio Ceva

División Física del Sólido - CNEA y CONICET -

Una característica (y un problema) esencial de los fenómenos críticos, consiste en que el número de grados de libertad que participa en la determinación del comportamiento de un sistema físico, tiende a infinito al acercarse al punto crítico.

Las transformaciones de renormalización, R , implementan un conjunto de métodos para reducir el problema a uno donde se deba tratar sólo con un número pequeño de grados de libertad a la vez.

Si bien hay una gran diversidad de transformaciones en uso, es posible ilustrar las ideas generales mediante el procedimiento conocido como "decimación". Consideremos por simplicidad un sistema unidimensional, consistente de N spins S , ubicados a lo largo de una recta, que interactúa sólo con sus primeros vecinos. El hamiltoniano de un sistema como el descrito puede escribirse $H_N = \sum_{ij}^{(nn)} J S_i S_j$, donde (nn) indica que la suma se refiere a los vecinos próximos.

El procedimiento para reducir el número de grados de libertad de N a $N/2$ consiste en sumar sobre spins alternados (p.ej. sumar sobre S_1, S_3, S_5 etc.) dejando una función de los restantes (S_2, S_4, S_6, \dots). Formalmente, $RH_N = H_{N/2}$.

A partir de esta idea, pueden seguirse dos caminos; iterar (formalmente) esta transformación un número infinito de veces, o bien tratar de relacionar los casos de N y $N/2$ variables. En ambos casos, se buscan los puntos fijos, H^* , de la transformación: $RH^* = H^*$.

El estudio de esta relación, y del comportamiento del hamiltoniano en el entorno de H^* , permite obtener los índices críticos que caracterizan a las variables físicas (como magnetización, susceptibilidad, etc.). Estos procedimientos son numéricos, pues salvo casos triviales (como el ejemplo unidimensional) no se conoce un tratamiento analítico del problema.

Desde un punto de vista práctico, la mayor dificultad es encontrar una forma adecuada y manejable de R , para cada sistema.

El problema físico que estoy considerando en este momento, en este campo, es el de una red bidimensional, cuadrada, donde hay spins que tienen interacciones antiferromagnéticas con sus primeros vecinos, y ferromagnéticas con los segundos vecinos. Este sistema ha sido estudiado con diversos métodos aproximados, y se predice que los índices que caracterizan a su punto tricrítico son "clásicos". Esto, sin embargo, no está suficientemente claro.

ESTADOS ELECTRONICOS DE SISTEMAS DESORDENADOS

Norah V. Cohan* y Mariana Weissmann**

(*) División Física del Sólido, CNEA, y Fundación Sauberán

(**) División Física del Sólido, CNEA, y CONICET

Consideramos como sistemas desordenados, en forma muy general, cualquier conjunto de un número prácticamente infinito de átomos en interacción, para el cual no existe periodicidad en las tres direcciones del espacio, es decir, no existe un vector de onda \vec{k} para caracterizar los autoestados. En muchos casos estos sistemas son sólidos, pero en otros no, como mencionaremos más adelante. Nos interesa estudiar principalmente la densidad de estados electrónicos, pero también otras propiedades electrónicas como la localización de los estados, las energías de adsorción, etc. El otro objetivo básico de estos estudios es encontrar métodos de cálculo relativamente simples, que nos den una idea física acerca de los efectos más importantes para aplicarlos luego a materiales complejos específicos.

Para estudiar estos sistemas no periódicos existen dos grandes enfoques: 1) el de la física del sólido, que implica suponer el material infinito y por lo tanto una densidad de estados electrónicos continua, que se calcula en general a partir de una función de Green; 2) el de la química teórica, que considera grupos finitos de pocos átomos y que supone que los efectos de borde no son importantes o que se pueden reducir por distintos procedimientos de cálculo.

Mediante el enfoque de la física del sólido hemos estudiado: 1) aleaciones desordenadas y materiales amorfos. Usamos un hamiltoniano de enlaces fuertes (tight-binding) simple, con el objeto de estudiar cómo se introduce el desorden y cómo se promedia sobre las configuraciones desordenadas¹⁻⁵); también aplicamos estos métodos a un material específico⁶). 2) Superficies y adsorción. En estos casos no hay que promediar sobre distintas configuraciones. Al sistema sólo le falta periodicidad en la dirección perpendicular a la superficie, si ésta no tiene nada adsorbido, o en las tres direcciones cuando hay adsorción. Existe por lo tanto una única configuración y esto nos permite mejorar el hamiltoniano tight-binding introduciendo efectos de recubrimiento y de repulsión electrónica intraatómica⁷⁻⁹), en el cálculo de la energía de adsorción de hidrógeno en grafito.

Mediante el enfoque de la química teórica hemos retomado el proble-

ma de los materiales amorfos para sistemas que presentan una transición metal-aislador, como la banda de impurezas en semiconductores dopados, los álcalis en condiciones supercríticas y en matrices de gases nobles. El uso de cien o docientos átomos formando grupos bidimensionales nos permite usar hamiltonianos más sofisticados y estudiar la localización de los estados y por lo tanto la transición metal-aislador como función del grado de desorden¹⁰⁻¹¹).

En resumen, esta línea de trabajo está orientada hacia el estudio de sistemas muy diversos cuya característica común es poseer un número prácticamente infinito de átomos sin propiedades de periodicidad en las tres direcciones del espacio. La conclusión más general que resulta de éstos (y naturalmente otros) trabajos es que tanto los métodos de la física del sólido como los de la química teórica pueden usarse, contribuyendo cada uno con una información complementaria al otro.

REFERENCIAS

- 1) M.Weissmann y N.Cohan; J.Phys.C: Solid St.Phys. 8 109 (1975).
- 2) M.Weissmann y N.Cohan; J.Phys.C: Solid St.Phys. 8L 145 (1975).
- 3) M.Weissmann y N.Cohan; J.Phys.C: Solid St.Phys. 9 473 (1976).
- 4) N.Cohan y M.Weissmann; J.Phys.C: Solid St.Phys. 10 383 (1977).
- 5) N.Cohan, C.Efeyan y M.Weissmann, J.Phys.C: Solid St.Phys. 9L 679 (1976).
- 6) N.Cohan y M.Weissmann; Solid St.Comm. 16 853 (1975).
- 7) N.Cohan, M.Gordon y M.Weissmann; Solid St.Comm. 20 219 (1976).
- 8) N.Cohan, M.Gordon y M.Weissmann; Solid St.Comm. 22 181 (1977).
- 9) N.Cohan y M.Weissmann; "Computers in Chemical Research and Education"; Plenum Press, New York, 1977. Ed.: E.Ludueña, N.Sabelli y A.C.Wahl.
- 10) M.Weissmann y N.Cohan; J.Phys.F: Metal Phys. 7 913 (1977).
- 11) N.Cohan y M.Weissmann; J.Phys.C: Solid St.Phys. En prensa (1979).

FENOMENOS CUANTICOS EN SUPERCONDUCTORES

F. de la Cruz

Centro Atómico Bariloche (Comisión Nacional
de Energía Atómica)

Las actividades del grupo de Bajas Temperaturas del CAB cubren diversas áreas. En ésta charla sólo mencionaré los títulos de ellas y el personal involucrado y me referiré a una en particular, en la cual he trabajado en colaboración con J. Luzuriaga y H. Fink.

El uso de la superconductividad superficial como termómetro localizado, en experimentos de transferencia de calor fue sugerido en este laboratorio. Comprobada su utilidad se decidió encarar la medición de propiedades termodinámicas de ese estado del material, para comprobar las teorías existentes. Los resultados mostraron que la superconductividad superficial es un estado termodinámico reversible de acuerdo a los predicho teóricamente, en desacuerdo con resultados experimentales anteriores. Este estado deja de ser reversible si el dominio superconductor es múltiplemente conexo. El dominio puede establecerse experimentalmente cuando se coloca un cilindro superconductor en un campo magnético paralelo a su eje. En estas condiciones se midió la magnetización del cilindro, a campo constante, en función de temperatura. El resultado de estas mediciones mostró que la susceptibilidad se hace diamagnética debajo de la transición superconductor superficial pasa por un máximo y luego cambia de signo, haciéndose paramagnética. Este fenómeno llamó la atención pues no hay ninguna explicación clásica que pueda dar cuenta de este comportamiento magnético, cuando la única variable exterior es la temperatura. Se puede mostrar que, dada la característica cuántica del estado superconductor, si la condición de conservación del estado cuántico prevalece sobre la de mínima energía, la magnetización del sistema, su módulo y signo quedan fijados por esa condición. Al variar temperatura cambia la energía de condensación (número de electrones superconductores) y varían las distancias características del superconductor (longitud de coherencia y de penetración). Se pudo mostrar que, teniendo en cuenta estas variaciones e imponiendo

conservación del número de fluxoides a través del cilindro, en las ecuaciones de Ginzburg-Landau, la variación de signo de la magnetización como función de temperatura, es una manifestación cuántica en un estado macroscópico.

ESTUDIO DE AUTODIFUSION Y DIFUSION DE SOLUTOS EN METALES Y ALEACIONES

F. Dymont

Departamento de Materiales -CNEA-

La difusión en metales es un tema que, en general, está bien entendido. Hay un gran cuerpo de datos confiables en difusión en volumen -algo menos en difusión en borde de grano- cuyas características salientes son adecuadamente explicadas por tratamientos teóricos de diversos grados de sofisticación. La difusión en la mayoría de los metales ocurre por un mecanismo de vacancias y el cúmulo de información que existe permite establecer ciertas reglas semiempíricas que se han dado en llamar "condiciones normales" para la difusión. Cuando estas condiciones no se cumplen, la hipótesis de trabajo consiste en suponer que el mecanismo de vacancias solamente no basta para explicar los resultados experimentales y, entonces, se trata de determinar cuál o cuáles son los mecanismos posibles que suman su efecto al de vacancias.

En el campo de la autodifusión en metales uno de los pocos problemas abiertos consiste en la dilucidación de los mecanismos que operan en Ti, Zr y Hf en ambas fases: α , hcp y β , bcc. En el Grupo de Difusión se encaró este problema bajo diferentes aspectos: autodifusión, efecto isotópico, factor de correlación (F. Dymont y E. Santos). Los resultados obtenidos así como el resto de los publicados en la literatura no permiten, hasta ahora, decidir sin ambigüedad cuáles serían los mecanismos actuantes. Al presente, sin embargo, el número de posibles explicaciones se ha reducido y el modelo más favorable para la fase β parece ser el de Sánchez y DeFontaine.

En el campo de la heterodifusión en metales también hay una gran cantidad de datos experimentales y ellos permiten deducir, cómo para la autodifusión, condiciones normales. Aquí, las 'anomalías' abarcan un grupo más numeroso de elementos y, en particular en Ti, Zr y Hf el comportamiento en difusión de ciertos solutos se aleja totalmente de las condiciones normales, nuevamente en ambas fases, siendo más notable en fase

Los resultados experimentales se explican, en este campo, admi-

tiendo la disolución parcial intersticial de los solutos que muestran tal comportamiento. Se trata de elementos que normalmente disolverían sustitucionalmente. En el Grupo de Difusión se estudió fundamentalmente el comportamiento de solutos en Zr (R.Tendler en colaboración con F.Varotto y J.A.briata del CAB) y se sistematizó el mismo en función de parámetros tales como radio atómico y valencia. Se estableció un criterio para predecir la posibilidad de una disolución intersticial en Zr a partir de tamaños atómicos, aspectos de los diagramas de equilibrio y las reglas de H.Rothery que controlan la solubilidad sustitucional.

Con técnicas de correlaciones angulares perturbadas (TDPAC) se mostró experimentalmente en uno de los casos anómalos (Ag en In) que parte de la Ag^{111} que difundió en In había disuelto intersticialmente en la red del mismo (F.Dyment en colaboración con el grupo de A.L.García del Departamento de Física de la Universidad Nacional de La Plata).

Difusión en Interfases. Este campo es más reciente y en él existen muy pocos trabajos publicados. En el Grupo de Difusión se estudió la difusión de Ag^{110} en las interfases β/γ_2 del sistema Cu-Al (F.Dyment, J.E.Ruzzante y S.Kurokawa), del cual existía evidencia por autoradiografías de que la difusión a lo largo de ciertas interfases era más rápida que la difusión en volumen en cada una de las fases. Los resultados obtenidos mostraron que todas las interfases son caminos rápidos para la difusión pues se pudo demostrar con Microscopía Electrónica de Barrido que la naturaleza promedio de aquéllas es la misma en todos los casos.

La explicación dada en este trabajo difiere sustancialmente de la de los autores anteriores y se basa en el rango de penetración de las partículas beta emitidas por la Ag^{110} en el Cu-Al. También se midió cuantitativamente el coeficiente de difusión en las interfases a 600 °C obteniéndose valores varios órdenes de magnitud superiores a los de volumen, los que fueron previamente medidos en ambas fases.

Trabajos en curso y líneas a desarrollar.

Heterodifusión: Se continúa el estudio de solutos rápidos en Zircaloy y aleaciones de Zr-Sn (R.Tendler y L.Nicolai) como parte de un programa de apoyo básico a PPFAE.

Se comenzó el estudio de ciertos solutos en Fe y aleaciones de Fe-Mn y Fe-Si (F.Dyment, S.Kurokawa y J.E.Ruzzante).

En ambos casos interesa el comportamiento de difusión de tales solutos para contribuir al entendimiento de las cinéticas de recristalización y precipitación en aleaciones de Zr de interés nuclear y en aceros microaleados (en particular con Nb). Esto último como parte de un programa de trabajo en colaboración con el Ing. A.Hey del Departamento de Materiales.

Difusión en Interfases: Se continúa el trabajo en Cu-Al con el estudio de la difusión de Ni^{63} en las mismas interfases β/γ_2 para verificar el modelo sugerido en el caso de la Ag^{110} (F.Dyment y R.P.Kamenetzky).

Se emprenderán luego estudios de esta naturaleza en otros sistemas de interés nuclear.

PROPIEDADES MAGNETICAS Y CRISTALINAS EN SOLIDOS AISLADORES

C. Fainstein

Centro Atómico Bariloche , - CNEA -

Propiedades electrónicas de iones de transición son estudiadas utilizando espectrometría de Resonancias Magnéticas (RM). Si las muestras son cristales diamagnéticos conteniendo centros paramagnéticos, resulta además posible estudiar propiedades cristalinas.

En el contexto de RM, propiedades electrónicas significa determinar la contribución de las distintas interacciones donde intervienen momentos magnéticos o eléctricos a la energía (electromagnética) absorbida entre dos niveles de energía del centro paramagnético, desdoblados por un campo magnético exterior. Propiedades cristalinas resultan de la contribución que surge de la ubicación del defecto en la red cristalina, y del acople entre las vibraciones de la red con el defecto.

Respecto a este tipo de problemas, nos hemos dedicado específicamente al estudio de:

- i) estructura electrónica de la impureza, su identificación y localización en la red cristalina,
- ii) interacción hiperfina, determinación de parámetros nucleares y efecto de la red cristalina,
- iii) interacción superhiperfina, efecto de primeros vecinos,
- iv) efectos de temperatura y del estado de tensiones internas de la red,
- v) efectos de deformación de la red cristalina.

Propiedades magnéticas de compuestos magnéticamente concentrados, que experimentan cambios de fase magnética en función de temperatura, también pueden ser estudiados aplicando espectroscopía de RM. Con respecto a este tipo de problemas nos hemos dedicado a:

- i) caracterización de las fases paramagnética y antiferromagnética,
- ii) determinación de campos efectivos, campo de anisotropía y de intercambio,
- iii) contribución de campo cristalino.

La realización de estos trabajos ha implicado el desarrollo de distintos espectrómetros de RM (paramagnética electrónica, antiferromagnética y doble nuclear-electrónica) en 10 y 35 GHz, con posibilidad de variar la temperatura de la muestra (300 a 1.5 K) y de aplicar presiones axiales hasta 1.000 kg cm^{-2} .

Durante 1979 se iniciará la aplicación de RM al estudio de aleaciones metálicas con propiedades superconductoras que exhiben ordenamiento magnético.

Mayor detalle sobre los trabajos que se realizan en la División Resonancias Magnéticas del Centro Atómico Bariloche (CAB) pueden encontrarse en el "Informe de Actividades en Física de Sólidos", CNEA-CAB, 51-78, 1977.

1. 79.25

OBSERVACION DE PEQUEÑOS DEFECTOS CRISTALINOS
POR MICROSCOPIA ELECTRONICA

M. Ipohorski

Departamento de Materiales - CNEA -

En la observación de defectos cristalinos por microscopía electrónica, el contraste se origina por las diferencias en las intensidades electrónicas difractadas por las distintas zonas de la muestra. El contraste depende de las condiciones de difracción de la lámina delgada y de la naturaleza intersticial o vacancia del defecto estudiado. En el caso particular de lazos de dislocaciones, existen criterios para determinar la naturaleza de los mismos cuando son mayores que unos 300 ó 400 Å. Pero estos criterios dejan de ser aplicables cuando los lazos son pequeños, pues los contrastes correspondientes a segmentos diametralmente opuestos se superponen, y la imagen electrónica se convierte en una mancha oscura más o menos difusa.

Estos pequeños lazos se observan frecuentemente en metales irradiados con neutrones, pero hasta hace unos años no existían métodos para poder determinar la naturaleza de estas pequeñas manchas (black dots). Recién en 1965 los cálculos de contraste de Ruhle y col. condujeron al desarrollo de la denominada técnica estereoscópica. Esta se basa en el hecho de que en la orientación exacta de Bragg, la imagen de un pequeño lazo consta de una parte clara y una parte oscura. El sentido del vector \vec{T} que une la parte oscura con la brillante varía con la profundidad del defecto dentro de la lámina delgada de tal manera que p.ej. para un defecto intersticial:

- Si éste está situado entre la superficie inferior de la lámina y ξ_g (distancia de extinción) el vector \vec{T} es paralelo al vector de difracción \vec{g} .
- Si el lazo está situado a una profundidad comprendida entre $1/4 \xi_g$ y $3/4 \xi_g$, el vector \vec{T} es antiparalelo a \vec{g} , y así sucesivamente.

El sentido de \vec{T} se invierte en cada capa si el lazo es de tipo vacancia. Entonces, observando el contraste que presenta cada lazo cuando la lámina

está orientada en la posición de Bragg, y midiendo su profundidad dentro de la lámina por estereomicroscopía, es posible determinar la naturaleza de pequeños defectos.

Inmediatamente esta técnica comenzó a aplicarse a problemas de daño por radiación. Los laboratorios de Cambridge y de Stuttgart obtuvieron resultados aparentemente contradictorios en el caso del Cu irradiado con neutrones. Las mediciones de Stuttgart correspondieron a lazos de vacancias mientras que en Cambridge se determinó que todos los lazos eran de tipo intersticial. Ambas escuelas siguieron perfeccionando las técnicas experimentales, y fue así que un análisis más cuidadoso permitió detectar algunos lazos de intersticiales en las muestras en las que se había observado solamente defectos tipo vacancia. En Inglaterra se continuó estudiando la influencia de la dosis y de las impurezas sobre la naturaleza del daño, llegándose a la conclusión de que los lazos de intersticiales se producen directamente en la zona de gran desorden o "spike" producida alrededor de un átomo golpeado por un neutrón. La zona central del spike, rica en vacancias, colapsa y da origen a uno o más lazos de vacancias. Este modelo describe ya más razonablemente los resultados de ambas escuelas. Quedaba solamente por determinar cuál podía ser otra variable que determina las pequeñas discrepancias todavía existentes. En el Departamento de Materiales de la CNEA se continuaron estos estudios, centrando la atención en el posible efecto de la temperatura durante y después de las irradiaciones. Los resultados confirmaron el modelo anterior y conciliaron las aparentes controversias sobre el tema. Actualmente las técnicas de estereomicroscopía se aplican al estudio de pequeños defectos introducidos tanto por radiación como por templeado o deformación en un metal, y no existen dudas acerca de su validez. Asimismo se confirman de esta manera las predicciones de la teoría dinámica de la difracción de electrones.

PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN SISTEMAS DESORDENADOS

D.H.Kurlat y M.Rosen
Facultad de Ingeniería (U.N.B.A)

El trabajo de nuestro Laboratorio está centrado en el estudio de sistemas no cristalinos (semiconductores líquidos y amorfos, metales líquidos). En estos materiales estudiamos sus propiedades de transporte atómico (difusión), transporte electrónico (poder termoeléctrico) y ciertos aspectos de la transición solido-líquido.

Difusión

Es un hecho bien conocido que la viscosidad de los compuestos líquidos A(IV)-B(VI) no siguen ni la ley de Arrhenius ni la de Bachinskii en un rango de temperaturas comprendido entre la $T_{\text{Fusión}}$ y $T_{\text{Fusión}} + 150^{\circ}\text{C}$ aproximadamente. Se puede esperar un comportamiento similar para los coeficientes de autodifusión y con ese fin hemos emprendido un estudio sistemático de esos sistemas líquidos. Elegimos en primer lugar el compuesto $\text{Sn}_{0.5}\text{-Te}_{0.5}$ (x_i = fracción atómica). Este semiconductor tiene una estructura f.c.c. al estado sólido, careciéndose de datos sobre su estructura al estado líquido, aunque el valor de su entropía de fusión (~ 10 u.e.) sugiere un cambio apreciable en el ordenamiento atómico, cuando funde.

Los coeficientes de autodifusión, $D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Sn}}$ y $D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Te}}$ fueron medidos utilizando la técnica de la célula de cizallamiento. Los resultados muestran que mientras el $D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Sn}}$ crece hasta los 880°C aproximadamente y luego varía lentamente, el $D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Te}}$ crece linealmente en el mismo intervalo ($805^{\circ}\text{C} < T < 950^{\circ}\text{C}$). Por otra parte $D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Sn}} > D_{\text{Sn-Te}}^{\text{Te}}$. Estos resultados pueden explicarse suponiendo que el Sn-Te líquido es una "mezcla" de cadenas formadas por átomos de Sn y de Te y átomos "libres", siendo además el volumen atómico del Sn menor que el del Te. El tratamiento cuantitativo de estos procesos es difícil por la ausencia de modelos adecuados, de la ausencia de simetría radial y de la imposibilidad de aplicar la ecuación de Boltzman a fluidos densos. Actualmente tratamos de poner a punto una técnica que permita obtener los perfiles de concentración durante la difusión y no después de ella.

Poder termoeléctrico

Las mediciones del $D_{\text{Sn-Pb}}^{\text{Sn}}$ (eutéctico) en función de la temperatura

muestran una inflexión alrededor de los 300°C. Este comportamiento se puede atribuir a cambios en las estructuras atómica y electrónica. Por otra parte la teoría de Ziman, utilizando la ecuación de transporte de Boltzman, liga las propiedades de transporte electrónico con el factor de estructura líquido y con los potenciales interatómicos. Por lo tanto, puede esperarse que el poder termoeléctrico, S , del líquido muestre asimismo una inflexión alrededor de los 300°C. Hemos medido $S = f(T)$ para un rango de temperaturas $200^\circ\text{C} < T < 300^\circ\text{C}$. El gradiente de temperatura era pequeño ($\Delta T \sim 30^\circ\text{C}$). La reproducibilidad en las medidas no es muy satisfactoria y la dispersión de los datos experimentales no hace posible determinar si se produce el comportamiento esperado. La dispersión se debe a tres causas:

- 1) Termodifusión. Este efecto es imposible de evitar, aunque es posible hacer una estimación teórica (Drickamer) del error ($\leq 10\%$).
- 2) Imposibilidad en mantener la concentración del líquido constante durante la experiencia. Creemos que en nuestro caso particular este efecto es despreciable.
- 3) Debido a la gran corrosividad de los metales líquidos es necesario usar electrodos de W o Mo. El poder termoeléctrico de estos metales es mucho mayor que el de la aleación medida y se requiere una calibración muy precisa de los electrodos.

Suponiendo que el $\text{Sn}_{0.74}\text{-Pb}_{0.26}$ forma una aleación sustitucional es posible hacer una estimación teórica del valor de S . Con esta hipótesis, el valor calculado está en buen acuerdo con los valores experimentales. Las próximas medidas de S se harán en el sistema $\text{Sn}_{0.5}\text{-Te}_{0.5}$ líquido.

Enfriamiento ultrarrápido y efecto Mössbauer

La absorción γ resonante es una técnica muy sensible, capaz de detectar pequeños cambios en la estructura electrónica de los materiales a estudiar. Sin embargo, es inaplicable a sistemas con coeficientes de difusión grandes ($\geq 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{seg}$). Por lo tanto hemos tratado de solidificar lo más rápidamente posible las muestras líquidas de Sn-Pb (eutéctico) a fin de "retener" las propiedades del líquido. Para conseguir dicho enfriamiento ultrarrápido, se desarrolló en nuestro Laboratorio un equipo que aplasta la muestra líquida entre dos pistones ("splat-cooling"). Se comprobó que el corrimiento isomérico (I.S) era función de la temperatura inicial del líquido. Para $T_{\text{Fusión}} < T < 300^\circ\text{C}$ el

I.S. era de 2.53 cm/seg aproximadamente y para $300^{\circ}\text{C} < T < 600^{\circ}\text{C}$, el I.S. ~ 2.6 cm/seg (manteniéndose casi constante en todo este rango de temperatura). Es de hacer notar que los cambios en el I.S. aparecen a temperaturas similares a aquellas donde se observan cambios en el $D_{\text{Sn-Pb}}^{\text{Sn}}$.

En principio el I.S. da cuenta de la densidad de electrones s en el núcleo. Dos factores deben ser tomados en cuenta para explicar los cambios observados:

- a) La velocidad de enfriamiento de cada muestra es función de la temperatura inicial. Esto daría lugar a una diferente estructura cristalina, la que indirectamente influiría sobre los estados electrónicos.
- b) La estructura electrónica del líquido es función de la temperatura. Se puede suponer (lo que confirmarían las medidas de conductividad) que el número de electrones de conducción aumentaría la densidad de electrones s en el núcleo.

Por el momento no nos es posible poder distinguir cual de estos dos efectos es el predominante. Medidas complementarias (p. ej. Rayos X, efecto Hall) serían de gran utilidad. El mismo tipo de experiencia se efectuará en $\text{Sn}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$.

PROBLEMAS DE NUCLEACION Y CINETICA DE CRECIMIENTO DE CRISTALES

Laura Levi

División Física del Sólido, CNEA, y CONICET

Se estudia el proceso de solidificación a partir de líquidos sobreenfriados, tomando como ejemplo el caso del sistema agua-hielo. En particular, se aplica la teoría de nucleación heterogénea para interpretar las características del proceso de acreción de gotas sobreenfriadas, que congelan sobre un colector, formando estructuras policristalinas de hielo.

El estudio de este fenómeno ha demostrado que:

1) Cuando gotas sobreenfriadas, de las dimensiones de 20 a 200 μm de diámetro, hacen impacto sobre un sustrato de hielo, a una velocidad del orden de 10 a 30 m/sec (experiencias realizadas en túnel de viento), nuevos cristales pueden formarse en las mismas, con una orientación preferencial tal que la dirección cristalina de máxima velocidad de crecimiento se extiende sobre la superficie del sustrato. En estas condiciones un sustrato no convenientemente orientado no puede continuar dentro de las gotas, aún en temperaturas apenas $< 0^\circ\text{C}$, donde cristales muy grandes con respecto a las gotas pueden formarse, cuando la orientación preferencial se ha establecido.

En estas condiciones, el tamaño de los cristales depende en forma exponencial del sobreenfriamiento ΔT .

2) Cuando gotas sobreenfriadas, de tamaño comparable al indicado anteriormente, colisionan con el sustrato a una velocidad de pocos cm/sec (velocidad de caída libre en el aire), nuevas orientaciones no se forman en las mismas, para toda temperatura $T \geq -10^\circ\text{C}$. Para $T < -10^\circ\text{C}$, cristales con nuevas orientaciones empiezan a formarse, con una probabilidad P que depende de la orientación del sustrato. Para cada sustrato, dicha probabilidad aumenta rápidamente en un estrecho intervalo de temperaturas, donde se pasa rápidamente de $P < 0.1$ a $P \sim 1$. El fenómeno es en este caso similar al que se observa para la nucleación homogénea de un cristal, a partir de sus gotas sobreenfriadas.

En estas condiciones, las orientaciones que tienen mayor probabilidad de continuar o desarrollarse en las gotas son las que crecen con su dirección de máxima velocidad de crecimiento aproximadamente normal a la superficie del sustrato.

La aplicación de la teoría de nucleación a estos resultados permite evaluar la energía de nucleación ΔG^* , que debe introducirse en las expresiones que dan la razón de nucleación, para obtener una correcta descripción del fenómeno. Se obtiene $\Delta G^* \sim 2 \times 10^{-10} / \Delta T^2$ erg. Esta energía es aproximadamente un orden de magnitud menor que la energía de nucleación homogénea, para el mismo ΔT . Atribuyendo a los embriones forma de calotas esféricas, se deriva, a partir del valor de ΔG^* , el valor del ángulo de contacto θ del embrión sobre el sustrato, y, en consecuencia, el de la energía de interfase embrión-sustrato. Estos resultan $\theta \sim 50^\circ$, $\gamma_{es} \sim 10$ erg/cm². Se obtiene así, para γ_{es} un valor notablemente inferior al de la energía libre de límite de grano, $\gamma_{gb} \sim 60$ erg/cm².

La diferencia observada entre γ_{es} y γ_{gb} sugiere que la energía libre de la superficie de separación entre dos granos cristalinos de dimensiones macroscópicas puede diferir substancialmente de la que corresponde a la superficie de separación entre el cristal y un embrión de dimensiones submicroscópicas.

APLICACION DE LA TECNICA CORRELACIONES ANGULARES PERTURBADAS (TDPAC)
AL ESTUDIO DE DAÑOS PUNTUALES

A. López García

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, U.N.L.P.

La técnica TDPAC ha sido aplicada en los últimos años con el fin de estudiar algunos problemas de la Física del Estado Sólido. A partir de la interacción hiperfina entre la sonda nuclear y el sólido es posible determinar campos magnéticos (CM) y gradientes de campo eléctrico (GCE) que reflejan propiedades de la red.

En lo que sigue consideraremos únicamente los campos originados por defectos puntuales (vacancias, intersticiales o impurezas) en redes de simetría cúbica. En los metales ferromagnéticos (Fe, Co, Ni y Gd) un defecto próximo a la sonda nuclear altera el valor del CM (que correspondería a un sitio no perturbado) y da lugar al origen de un GCE. Aún cuando la detección de un GCE garantiza la presencia de un defecto próximo a la sonda, no es suficiente para identificarlo. Para los metales cúbicos no magnéticos la situación es similar al caso anterior. Los resultados obtenidos en Cu, Ag, Au y Pt no son totalmente concluyentes.

Desde el punto de vista teórico el cálculo del GCE producido por un tipo de defecto es muy complicado. Aún cuando uno pudiera determinar la posición del mismo, es difícil determinar su carga efectiva, debido a la redistribución de los electrones de conducción.

En conclusión el método TDPAC no ha brindado resultados totalmente confiables pero es de esperar que futuras experiencias más cuidadosas den información que contribuya al conocimiento sobre defectos puntuales en redes cúbicas.

CARACTERIZACION DE DEFECTOS CRISTALINOS POR TOPOGRAFIA DE RAYOS X

Estela Manghi

División Física del Sólido, - CNEA -

La topografía por difracción de rayos X es una técnica de observación y caracterización de defectos aplicable a monocristales. Según la geometría (reflexión o transmisión) se puede observar la distribución de defectos en superficie o en volumen.

Entre los diferentes montajes experimentales, se describe el método de Lang en transmisión, por ser uno de los más corrientemente utilizados debido a su relativa sencillez.

Una haz de rayos X, emitido por una fuente de pequeñas dimensiones y colimado para limitar su divergencia de manera tal de recibir sólo la radiación difractada $K_{\alpha 1}$, se hace incidir sobre una lámina de caras paralelas de un cristal, colocada en posición de reflexión de Bragg para una familia de planos (hkl) determinada. Si el cristal es perfecto el haz difractado se registra sobre una placa fotográfica con una intensidad constante. Si una dislocación aislada por ejemplo intercepta el haz directo en un punto P, en esta región los planos (hkl) están distorsionados de modo que reflejan rayos del haz que en el caso del cristal perfecto estaban fuera de reflexión. Esta zona perturbadora en consecuencia da una imagen con un contraste más intenso respecto de la zona correspondiente a la red perfecta. La imagen directa o cinemática de la dislocación y el montaje es el correspondiente a una sección topográfica o exposición fija.

Si se desea obtener una vista en conjunto de la distribución de los defectos contenidos en la muestra, se aplica al conjunto cristal-placa un movimiento solidario de traslación. Cada punto de la dislocación intercepta sucesivamente al haz directo y da origen a su correspondiente imagen directa sobre la placa. Se obtiene entonces, una topografía por traslación o proyección topográfica del conjunto del cristal y de los defectos que contiene. (Equivale a una sucesión de "secciones").

La visibilidad y contraste de los defectos son función de distintos parámetros: naturaleza de los defectos, profundidad a que se hallan, absor-

ción del cristal, longitud de onda de la radiación y planos reflectores (hkl) elegidos. El análisis del contraste para distintas reflexiones es similar al caso de la M.E. y lleva a la indentificación de los vectores de Burgers que caracterizan a las dislocaciones.

Existen otros tipos de imágenes, intermedia y dinámica cuya interpretación requiere el conocimiento detallado de los campos de ondas que se propagan en el cristal (T. dinámica de la difracción de rayos X).

Aplicaciones: la topografía de rayos ha sido utilizada para la observación de distintos tipos de defectos: precipitados, dislocaciones, bandas de crecimiento, fallas de apilamiento, maclas, paredes de dominios ferromagnéticos y ferroeléctricos, dominios de antifase, bandas de deslizamiento.

En cuanto al tipo de materiales observados, la limitación más importante está asociada con la densidad de dislocaciones máxima 10^4 a 10^6 cm^{-2} que puede contener la muestra para resolver dislocaciones individuales.

En el caso de metales ($\rho \sim 10^{12}/\text{cm}^2$) esto requiere una cuidadosa preparación de los monocristales con una densidad de dislocaciones apropiada y sólo permite la observación de defectos producidos en las primeras etapas de la deformación plástica.

Para otro tipo de materiales, semiconductores por ejemplo, Si, Ge, AsGa el método de Lang se revela como uno de las técnicas de caracterización más fructíferas a fin de detectar y controlar la influencia de los defectos introducidos durante la fabricación de dispositivos.

La resolución de la técnica de topografía es inferior a la de la ME pero tiene la ventaja de que es una técnica no destructiva que permite visualizar los defectos en volumen de zonas más amplias que las accesibles por ME: $2 \times 2 \text{ cm}^2$ es una zona típica que puede ser registrada por el método de Lang en un solo ensayo.

Los dominios de aplicación de la ME y la topografía de rayos X son diferentes. No son técnicas competitivas sino complementarias.

TRANSICIONES DE FASE EN FERROELECTRICOS HIDRATADOS

V. Massidda

División Física del Sólido , - CNEA -

Una de las principales líneas de investigación en la División de Física del Sólido, Departamento de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica la constituyen las transiciones de fase paraeléctrica-ferroeléctricas o -antiferroeléctricas en cristales hidratados-. Sobre este tema se están realizando estudios tanto experimentales como teóricos.

El grupo experimental, formado por la Dra. Benyacar y la Lic. Dussel, investiga la dependencia de la constante dieléctrica y del calor específico con la temperatura, para distintas sustancias; para algunas de éstas (arseniato de uranilo e hidrógeno hidratado sintético y sulfato de guanidina y uranilo hidratado) el carácter ferroeléctrico había sido previamente descubierto por el mismo grupo.

En esta exposición se describirán los trabajos realizados en el tema por el grupo teórico, integrado por los Lics. Hernando y Massidda

La idea básica subyacente en todos estos trabajos es una hipótesis sobre el mecanismo de la transición ferroeléctrica en cristales hidratados, según la cual la transición se debe al ordenamiento de los dipolos de las moléculas de agua. De acuerdo con esta hipótesis, en la fase de baja temperatura las moléculas de agua se orientan de acuerdo con sus interacciones electrostáticas (ya sea con los iones o de unas con otras), y en la de alta temperatura se desordenan debido a la agitación térmica. Esta hipótesis fue la primera en ser propuesta para una transición ferroeléctrica, pero fue posteriormente abandonada, y sólo recientemente fue retomada por algunos investigadores para el ferrocianuro de potasio trihidratado.

El primer trabajo realizado para poner a prueba esta hipótesis ha sido el cálculo de las orientaciones de las moléculas de agua en el ferrocianuro de potasio trihidratado, suponiendo que las mismas se comportan como estructuras rígidas que pueden reorientarse libremente manteniendo su posición en la red (en otras palabras, tienen tres grados de libertad rotacionales pero ninguno traslacional). Para las moléculas de agua se utilizó un modelo introducido con mucho éxito por Baur, consistente en tres cargas pun-

tuales ($\frac{1}{2}e$ en los sitios de cada hidrógeno y $-e$ en el del oxígeno, siendo e la carga de un protón). Los resultados del cálculo permiten reconciliar en buena medida los modelos propuestos por dos grupos de autores, y concuerdan notablemente con los datos obtenidos por difracción de neutrones, convenientemente reinterpretados. Este trabajo fue publicado en J. of Phys. C 11, p. 2865, 1978.

En otra línea de investigación, hemos introducido un modelo teórico para el estudio del mecanismo de transición ferroeléctrica arriba mencionado. Se considera un cristal genérico formado por un cierto número de subredes de cargas y dipolos puntuales. Estos últimos pueden reorientarse libremente manteniendo fija su posición en la red. A una dada temperatura una cierta fracción de dipolos estará desordenada con respecto a la orientación de equilibrio debido a la agitación térmica. Introduciendo un conjunto de funciones $n_i(\theta, \psi)$ para representar la fracción de dipolos de cada subred i que apuntan en la dirección caracterizada por los ángulos θ y ψ , es posible expresar la entropía del cristal en términos de las n_i . La energía electrostática correspondiente a una cierta situación de desorden también puede calcularse en términos de las n_i haciendo la habitual aproximación de campo promedio. De este modo hallamos la energía libre en función de las n_i . Mediante una técnica variacional hemos hallado un sistema de ecuaciones trascendentes que las n_i tienen que satisfacer para que la energía libre tenga un mínimo (en rigor, un extremo). El sistema es soluble por computación numérica, pero para cristales sencillos la solución es fácil de obtener. Nosotros hemos considerado algunos casos de redes tetragonales, obteniendo resultados de mucho interés cualitativo. En particular, en todos los casos hemos obtenido una transición ferro- o antiferro-paraeléctrica. El modelo es suficientemente general como para poder adaptarse a todo tipo de cristales iónicos que contengan moléculas reorientables. Este trabajo fue publicado en Physica A 94, p. 413, 1978. Actualmente se está trabajando en generalizar el modelo incluyendo subredes de cuadrupolos puntuales, con miras de aplicarlo al ferrocianuro de potasio trihidratado (cuyo comportamiento ferroeléctrico no puede explicarse con el modelo de dipolos puntuales).

También se está trabajando en aplicar el formalismo de pseudo-spin al ferrocianuro de potasio trihidratado. Este formalismo se aplica a sistemas que poseen dos configuraciones posibles y por lo tanto se presta para estudiar el comportamiento de las moléculas de agua en dicho cristal, pues

ellas tienen dos orientaciones equivalentes.

Al realizar los trabajos que se acaban de describir se hace amplio uso de una técnica (el "método de suma por planos") de gran utilidad práctica para el cálculo de cantidades tales como el campo eléctrico de una red de cargas o de dipolos puntuales. Esta técnica ha sido puesta a punto por nosotros (J. of Phys. C 9, p. 2217, 1976; Physica B 85, p.311, 1977; Physica B 95, p. 317, 1978; otro artículo a ser publicado) y los programas de cálculo que hemos desarrollado están a disposición de quien los necesite.

DINAMICA DE REDES

R.Migoni

Departamento Materiales - CNEA

Las líneas de trabajo en desarrollo son las siguientes:

- 1) Distorsiones de la red cristalina producidas por defectos puntuales en metales.
- 2) Dinámica de red en un sistema con fluctuaciones de valencia.
- 3) Fonones y espectro Raman del KTaO_3 .

Un problema básico común es la elección del modelo de interacción entre átomos de la red. Si se consideran iones puntuales interactuando a través de un potencial central o de fuerzas tensoriales generales (Born-von Karman) es a menudo necesario extender bastante más allá de los primeros vecinos el rango de las interacciones, con la consiguiente proliferación de parámetros. Ello se debe a distorsiones electrónicas de largo alcance provocadas por desplazamientos de los núcleos. Por eso es conveniente incluir explícitamente estos efectos en el modelo. En los cálculos más abajo descritos se utilizan los siguientes modelos:

a) Modelos de cáscaras: la dispersión de la nube electrónica de cada ión es simulada mediante una cáscara deformable en torno a un carozo. Dicha deformabilidad puede ser de carácter monopolar (compresión), dipolar (desplazamiento de la cáscara respecto al carozo), etc.

b) Modelo de gas electrónico uniforme y compresible.

Los trabajos realizados en las tres líneas mencionadas son:

1) Mediante el método de la función de Green estática se compararon distorsiones obtenidas en Cu con los modelos (a), (b) y el de Born-von Karman. Se planea realizar el mismo tipo de estudios en metales de estructura hexagonal compacta.

2) Se intenta simular en una cadena diatómica las fluctuaciones de valencia de una de las especies atómicas mediante una cáscara compresible.

3) Los parámetros de un modelo de cáscaras anteriormente propuesto^{*)} para la dinámica de ferroeléctricos tipo perovskita fueron reajustados en el caso del KTaO_3 sobre la base de nuevos datos experimentales acerca de las cur-

*) R.Migoni, H.Bilz y D.Bauerle; Phys.Rev.Lett. 37, 1155 (1976).

vas de dispersión de esta sustancia. Estas resultan excelentemente reproducidas por el modelo, así como los espectros de scattering Raman por fonones. La dependencia de los fonones con la temperatura, originada en el mismo mecanismo que da cuenta de scattering Raman, explica la existencia de una transición ferroeléctrica cerca de 0°K y anomalías observadas en el calor específico a bajas temperaturas.

PROPIEDADES MECANICAS DE METALES Y ALEACIONES DE INTERES NUCLEAR

F.Povolo, J.C.Crespi y H.González

División Daño por Radiación - Dto. de Materiales - CNEA

La División Daño por Radiación tiene como objetivo el estudio de las propiedades mecánicas de metales y aleaciones de interés nuclear, tanto antes, durante y después de la irradiación neutrónica. A tal efecto, las tareas realizadas y en curso, se pueden clasificar en tres grandes grupos:

1. Estudio de propiedades mecánicas pre-irradiación.
2. Diseño, construcción y puesta en operación de dispositivos para irradiación neutrónica en los reactores RA.1 y RA.3.
3. Estudio del efecto de la irradiación neutrónica sobre el comportamiento mecánico de metales y aleaciones.

En lo que respecta al estudio de propiedades mecánicas pre-irradiación, se efectúan ensayos de tracción, relajación de tensiones, creep, fatiga y fractura. El propósito de estos trabajos es el de estudiar los mecanismos básicos que controlan las propiedades mecánicas de las aleaciones de Zr y aceros, a temperaturas del orden de las de servicio en los reactores de potencia. Se han concluido y publicado varios trabajos en Zry-4 y aceros del tipo de los que se utilizan en el recipiente de presión de la CNA.1. Además, se han efectuado análisis de fallas tanto en problemas de la industria convencional como en componentes de centrales nucleares.

La División tiene en operación un dispositivo de irradiación para bajas temperaturas (Nitrógeno líquido) en el reactor RA.1. Con el mismo, se ha estudiado el endurecimiento por irradiación neutrónica en monocristales de Zn y Mg, como así las etapas de recuperación del daño que ocurren a mayores temperaturas.

Se está construyendo un dispositivo, en el mismo reactor, para estudiar creep en pila y crecimiento por irradiación en aleaciones de Zr, a temperaturas de interés tecnológico.

Se está completando un dispositivo de irradiación para el reactor RA.3, para una temperatura del orden de 300°C, con el que se efectuarán ensayos de creep y relajación de tensiones por curvado en tubos y probetas planas de Zry-4. Se irradiarán, también, probetas de aceros estructurales utilizados

en recipientes de presión para centrales nucleares de potencia, para estudiar la fragilización de los mismos por irradiación neutrónica.

Además, se realizan trabajos relacionados con el Programa de Vigilancia del material del recipiente de presión de la CNA, en lo referente al estudio del comportamiento mecánico de las probetas colocadas en diferentes posiciones dentro del reactor.

Finalmente, la División ha cumplido y cumple tareas docentes en el campo de las propiedades mecánicas de metales y aleaciones, tanto en CNEA como en otros centros de investigación en el país.

DEFECTOS MICROESTRUCTURALES EN SOLIDOS CRISTALINOS

E.J.Savino, S.Harriague, R.Migoni, A.M.Monti, C.E.Laciana, G.Coroli,
N.S. de De Grande, C.N.Tomé, C.A.Ceccato, R.Nemirovsky y E. Lema

Departamento de Materiales - CNEA-

Se resume en este trabajo la filosofía y líneas de trabajo del Grupo de Teoría del Departamento de Materiales de la CNEA. Dado que las líneas de aplicación tecnológica serán desarrolladas en otra presentación se da especial prioridad en éste a las líneas de investigación y desarrollo. El fin tecnológico de la investigación es el desarrollo de códigos para predicción del comportamiento termomecánico de elementos combustibles en reactores de potencia. Este se encara dentro del propósito general de incrementar el conocimiento de los fenómenos básicos, a nivel microestructural, que determinan el comportamiento macroestructural, mecánico de los sólidos.

Los actuales temas de trabajo en el estudio de propiedades de defectos se concentran en dos áreas: teoría de comportamiento colectivo de defectos y estudio de la configuración estática de defectos.

En cuanto al estudio del comportamiento colectivo de los defectos se encara actualmente el desarrollo de modelos teóricos de los efectos de la sobresaturación de defectos puntuales producidos por la irradiación. Estos defectos migran hacia sumideros en la red y debido al movimiento o cambios dimensionales de estos sumideros (p.ej. trepado de dislocaciones de la red o crecimiento de circuitos de dislocación) se producen cambios macroestructurales. Se ha desarrollado una teoría de crecimiento (cambio de forma en ausencia de tensiones externas) de materiales anisotrópicos bajo irradiación y de creep (cambio de forma bajo tensiones) en idénticas condiciones. Estas teorías utilizan el formalismo de velocidades de reacción. Se halla además en desarrollo una teoría de migración de defectos en un medio discreto (red cristalina) en presencia de tensiones internas y externas.

En el estudio teórico de la configuración de defectos en redes cristalinas el énfasis se centra en cristales metálicos de estructura hexagonal

compacta. Esta elección se debe a la importancia tecnológica de metales de esta estructura y a la ausencia de cálculos detallados de los mismos en la literatura. Se utilizan las técnicas de cálculo de función de Green discreta de la red y simulación por computadora. Para estos cálculos la principal dificultad es la ausencia de potenciales interatómicos basados en primeros principios y que reproduzcan las propiedades de los defectos relevantes. En general se recurre a potenciales empíricos, con lo cual la simulación del defecto no es otra cosa que un ajuste a propiedades conocidas del sólido y extrapolación hacia aquellas que se desea conocer.

En la actualidad la investigación se concentra en el estudio de la configuración de vacancias e intersticiales, su volumen de recombinación y la disociación de dislocaciones parciales. Hasta el momento la investigación se ha limitado a estudiar el magnesio dadas las propiedades de simetría cristalina de este. En un futuro inmediato se encara el estudio de materiales con relación c/a diferente de la ideal.

Finalmente el Grupo Teórico cuenta con una línea de investigación en dinámica de sólidos. Esta línea se la espera orientar en un futuro inmediato al estudio de dinámica de defectos cristalinos. Los trabajos desarrollados hasta el momento se refieren al estudio de las propiedades dinámicas del KTaO_3 y se halla en desarrollo un modelo de dinámica de una red de valencia intermedia.

SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO DE ELEMENTOS COMBUSTIBLES

E.J.Savino, S.Harriague, G.Coroli, F.Basombrío, G.Sánchez Sarmiento, R.Migoni, A.M.Monti, C.E.Laciana, N.S. de De Grande, C.A.Cecatto y N.Lema
Departamento de Materiales - CNEA-

En esta exposición se detallan los planes de trabajo y metas alcanzadas por el Grupo de Teoría (G.T.) en el desarrollo de códigos de simulación del comportamiento de combustibles nucleares en servicio. Dichos códigos resultan imprescindibles para analizar la performance del combustible y para su diseño; su utilidad se extiende, resultando elementos muy valiosos para estudiar la influencia de distintas propiedades de los materiales constituyentes, analizar y programar experiencias de laboratorio y on pile, determinar la relevancia de modelos básicos de comportamiento en las condiciones de operación del reactor, etc...

Se analizan los fenómenos que ocurren en un elemento combustible en operación. En el caso de las pastillas de UO_2 , las características más relevantes son: baja conductividad térmica, fragilidad, alto creep para temperaturas y/o radiaciones elevadas, lo que resulta en altos gradientes térmicos y aparición de fisuras coexistiendo con zonas de comportamiento viscoelástico. Otros fenómenos a tomar en cuenta son el postsinterizado térmico y por irradiación, liberación de gases de fisión, hinchado por productos de fisión y migración de porosidad (reestructurado) bajo el gradiente térmico.

En la vaina de zircaloy resulta necesario considerar su comportamiento anisotrópico; al comportamiento termoelástico debe agregarse el creep térmico y por irradiación, y el crecimiento bajo irradiación.

A fines de una descripción de la barra combustible debe estudiarse la transferencia térmica pastilla-vaina, la interacción mecánica entre ambas (contacto), así como efectos localizados. Estos últimos se estudian usando códigos bidimensionales de elementos finitos, cuyos resultados pueden ser incluidos en los códigos de simulación de la barra en su totalidad.

El G.T. ha desarrollado los códigos PELT (comportamiento de la pastilla) VAINA (ídem de la vaina) y BACO (simulación de la barra combustible). Se trabaja en estrecha colaboración con el Centro de Cálculo del CAB, donde se han desarrollado códigos de elementos finitos para problemas termoelásti-

cos, termoplásticos y térmicos. De esta colaboración ha resultado un estudio del comportamiento de las arandelas de deformación usadas en el combustible CNA, y un análisis bidimensional de las fisuras en una pastilla de UO_2 , cuyos resultados están siendo realimentados en el código BACO.

Los resultados del código BACO muestran la importancia de considerar la anisotropía de la vaina, la aparición de fisuras en el UO_2 y, en general, de modelar la barra combustible de forma autoconsistente.

Las metas propuestas en esta línea de trabajo son:

- 1.- Desarrollo del código BACO: extensión a la descripción cuasi-bidimensional de toda la barra combustible y desarrollo de una versión para combustible CANDU.
- 2.- Introducción de nuevos modelos de comportamiento de materiales: se propone la introducción de modelos de creep y crecimiento por irradiación de la vaina desarrollados por el G.T.; actualización permanente de los modelos de Zrly a través de estrecha colaboración con grupos experimentales del CAC; introducción de modelos de liberación de gases desarrollados en el CAC.
- 3.- Parametrización del BACO y comparación con predicciones de otros códigos: se están analizando experiencias de la serie Mol realizadas por el KfK, así como las utilizadas en la comparación de códigos hecha por EPRI. Se están sentando las bases para comparar las predicciones de BACO con las de códigos similares desarrollados en Alemania Federal, el Reino Unido y Canadá.
- 4.- Estudio de problemas localizados: en conjunto con el Centro de Cálculo del CAB se proseguirá con el estudio de fisuras, así como de deformaciones localizadas en la vaina interactuante con las pastillas, transmisión de calor en un gap excéntrico y tensiones axiales en el caso de contacto pastilla-vaina.

ESTUDIO POR MICROSCOPIA ELECTRONICA DE MATERIALES FERROELECTRICOS

Lelia S. de Wainer

División Física del Sólido, - CNEA -

Se utilizó la técnica de observación por ME de réplicas decoradas con partículas de Au, Te, ClAg, etc. para la detección de dominios ferroeléctricos que no se pueden distinguir por MO en compuestos hidratados de uranilo. Este método se basa en que, en un cristal ferroeléctrico con una componente del vector polarización perpendicular a la superficie de clivaje, aparecen en la misma, zonas con distinta carga eléctrica; la densidad de núcleos de Au, etc. que se depositan en los dominios positivos es distinta de las que se depositan en las zonas cargadas negativamente. Con este método detectamos la presencia de dominios de forma irregular, de unos pocos micrones de diámetro en el nuevo ferroeléctrico de uranilo GUSH (sulfato de guanidina y uranilo hidratado).

Como en las superficies de clivaje de todos los cristales iónicos aparecen siempre zonas con distinta carga eléctrica, realizamos un estudio comparativo completo de las estructuras de decoración en materiales iónicos con composición química parecida a la del GUSH (GASH, ferroeléctrico, $GZnSH$, no ferroeléctrico) y en cristales iónicos cúbicos como el $ClNa$, FLi , típicamente no ferroeléctricos. La conclusión fundamental de este trabajo es que si bien la técnica resulta útil para poner en evidencia la presencia de dominios ferroeléctricos en cristales que no se pueden observar por transmisión, es necesario en todos los casos realizar un análisis exhaustivo de todas las estructuras superficiales para separar las de clivaje de las de dominios. Para ello es conveniente comparar en cada caso las estructuras observadas con las que aparecen en compuestos similares no ferroeléctricos.

Otro compuesto de uranilo que se estudió en nuestro laboratorio es el arseniato de uranilo e hidrógeno hidratado, que presenta una transformación de fase paraeléctrica (tetragonal) a antiferroeléctrica (a lo sumo rómbica, probablemente monoclinica) a $20^{\circ}C$ y otra de la fase anti-ferro a una fase ferroeléctrica a $-30^{\circ}C$. Estudiando por microscopía óptica este compuesto se observan dominios a $90^{\circ}C$ con una estructura fina.

Realizamos réplicas decoradas y sombreadas de este material para ver si los dominios presentan relieve. Aparecen estructuras en forma de lenguetas, que se pueden relacionar con los dominios y en su interior estructuras muy finas, separadas por menos de 0.1μ . En este momento estamos estudiando las estructuras, cerca de la temperatura de transición, en función de la temperatura. A temperaturas altas la densidad de esas estructuras disminuye.

Esta es toda la información que se puede sacar de réplicas; en este momento estamos adelgazando muestras para comenzar el estudio por microscopía electrónica de transmisión. Este estudio presenta dificultades experimentales grandes debido 1) a la preparación de las muestras, 2) el material se deshidrata en el vacío del microscopio. Para superar esta última dificultad estamos recubriendo las muestras con un film delgado de C y comenzamos a observarlas a temperatura de nitrógeno líquido. Esperamos que este estudio nos permita determinar los distintos tipos de interfases presentes y la orientación cristalográfica de las mismas. Por difracción de electrones esperamos poder determinar las simetrías de las fases de baja simetría.

RELEVAMIENTO DE EQUIPOS E INSTRUMENTAL

LABORATORIO DE DIFRACCION. División Física del Sólido, SC, CNEA.

Generadores de Rayos X

- 1) Generador Philips, PW 1140/00/60 para dos tubos no simultaneos.
- 2) " " , PW 1120/00/60 para un tubo
- 3) " " , PW 1010 para un tubo
Tubos de Cu, Mo, Fe, Co.

Cámaras de cristal único

- 1) Cámaras de Weissenberg (2) Nonius, integradoras. Cassete de 57,3 mm de diámetro. (Fotografías distorsionadas de la red recíproca pesada de un cristal único; estudio de simetrías y recolección de datos para estudios estructurales).
- 2) a) Cámara de precesión (integradora) Nonius. Pedido: Kit para alineación rápida de la cámara.
b) Cámara de precesión Charles Supper (Idem que 1), pero fotos no distorsionadas. Para una misma orientación del cristal, brindan información complementaria).
- 3) Cámara de cristal fijo (Laue, etc) por reflexión y transmisión. Orientación de cristales de alta simetría.
- 4) Cámara de Gandolfi (para sacar diagramas de polvo a partir de un cristal único).

Cámaras de polvo

- 1) Cámara Debye-Scherrer, Philips, diámetro 115,6 mm.
- 2) " " " " , " , diámetro 57,3 mm.
- 3) " " " " , " , calentadora, Rigaku, diámetro 115,6 mm.
- 4) " de Gandolfi (diagrama de polvo a partir de cristal único, de diámetro 115,6 mm).
1), 2) y 3): Obtención de diagramas de polvo para identificación y/o refinamiento de celda unitaria.

Difractómetro de polvo

Difractómetro horizontal Philips. Registrador de velocidad variable.
Detector proporcional. (Idem que el punto anterior).

Densitómetro manual Nonius (de barrido bidimensional)

Ranuras 0,2 x 0,6 mm y 0,3 x 0,8 mm (rectangulares).
Ranuras de diámetro 0,3 mm a 0,6 mm (circulares)
(medida manual de densidades ópticas en fotografías tomadas con cámara de cristal único, integradas).
Instalándose: Densitómetro automático a tambor giratorio Optronics P1000, comandado por una minicomputadora LSI2-20, unidad de cinta magnética y dis-

LABORATORIO DE DIFRACCION (Continuación)

co. Lectora de cinta de papel y teletipo.

Varios

Microscopio polarizador, lupa estereoscópica (8 X hasta 40 X).
Microscopio calentador y enfriador.

LABORATORIO DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL. División Física del Sólido, SC,CNEA

a) Infrarrojo

- 1) Espectrofotómetro Beckman IR-33. Rango: 600-4000 cm^{-1} . Mediana resolución. Instrumento para análisis de rutina.
- 2) Espectrofotómetro Beckman 12. Rango 200-400 cm^{-1} . Alta resolución (máx. 0.5 cm^{-1}). Versátil, para trabajo de investigación, aunque ya anticuado.
- 3) Intercambio óptico IR11. Transforma el IR 12 en espectrofotómetro infrarrojo lejano, con rango teórico 33-600 cm^{-1} . Características similares al IR 12, purgable con aire seco. Empieza a funcionar bien a partir de 80 cm^{-1} . Muy anticuado, casi obsoleto.
- 4) Espectrofotómetro interferométrico Digilab B18. Funciona adosado a una computadora de control y transformación de interferogramas. Rango 10-500 cm^{-1} , resolución 0.1 cm^{-1} . Capacidad para sumar coherentemente 10.000 interferogramas. Instrumento avanzado de investigación. Será puesto en marcha este año.

b) Raman

Espectrofotómetro Jarrell-Ash 25-300. Resolución máx. 0.3 cm^{-1} . Doble monocromador, fototubo enfriado, contador de fotones. Instrumento moderno de investigación. Fuentes excitadoras: Láser He-Ne de 70 mW; Láser Ar de 4 W (1 W en 4880 Å).

c) Accesorios

Celdas IR y Raman para gases, líquidos y sólidos. Celdas IR y Raman enfriables hasta N_2 líquido. Celda Raman para líquidos multipaso. Facilidades para muestreo de sólidos y gases: pastilleros, líneas de vacío, dry box, etc; refinador zonal para crecimiento de monocristales; sistema de secado de aire con compresor y columnas de uso continuo; balanza de precisión.

GRUPO MÖSSBAUER. División Física del Sólido, SC, CNEA.

- . Espectrómetro Mössbauer de la fábrica "Elscint", con modos de aceleración y velocidad constantes, con velocidades entre ± 3 mm/sec a ± 300 mm/sec.
- . Horno "Rikor" para espectrometría Mössbauer. Rango de temperatura: 300°K-1000°K.
- . Crióstato de temperatura variable "Rikor" para esta espectroscopía. ΔT : 80°K-500°K; con sus accesorios.
- . Crióstato diseñado en el laboratorio. ΔT : 80°K-800°K.
- . Control de temperatura "Rikor" para ser usado entre 4°K-1000°K con todo tipo de termocuplas. Errores standard $\sim \pm 0.02$ °K.
- . Electrobalanza Cahn, pensada para medir susceptibilidades.
- . Multicanal Hewlett Packard de 4096 canales divididos en 4 memorias de 1024 canales c/u.
- . Contadores proporcionales.
- . Electrónica convencional para este tipo de equipos.
- . Graficadores.

LAB. DE PROPIEDADES FISICAS. División Física del Sólido, SC, CNEA.

- . Analizador Térmico Diferencial DUPONT 900. Opera entre -100°C y 650°C . Velocidad de calentamiento de 1 a $30^{\circ}\text{C}/\text{min}$. (Requiere frecuentes arreglos).
- . Componentes electrónicos:
 - Osciloscopio TEKTRONIX 565 con varios módulos
 - . 3C66 Amplificador de señales de transductores.
 - . 2A61 Amplificador diferencial de alta sensibilidad (desde $10\ \mu/\text{div}$).
 - . 3A7 Comparador diferencial.
 - . 3A3 " de 2 trazos.
 - . 3A74 Amplificador de 4 canales.
- . Puente HEWLETT PACKARD 4260 A, con oscilador interno de 1Khz y 100 mV.
- . Fuentes de Alta tensión, etc.
- . Microscopio polarizador con platina enfriadora y calentadora.
- . Instalándose: . Calorímetro diferencial de barrido PERKIN ELMER DSC2; opera entre -75° y 725°C .
Balanza electrónica AM-2 PERKIN ELMER ($0,1\ \mu\text{g}$ a 5 g).

GRUPO DE MICROSCOPIA ELECTRONICA. CAC, CNEA.

- . Microscopio electrónico de transmisión Philips EM 300, de 100 kV. Resolución normal: 10 Å; máxima: 3.5 Å. Portamuestras de: calentamiento (800°C), enfriamiento (-150°C) de doble inclinación. Dispositivo para difracción rasante de electrones. Con él se pueden observar diagramas de difracción de muestras masivas. Se aplica fundamentalmente para la observación de defectos cristalinos en láminas delgadas (500 a 5000 Å de espesor). Por transmisión.
- . Microscopio electrónico de barrido PSEM 500 Philips. Resolución 100 Å en electrones secundarios. Se utiliza en el estudio de topografía superficial. Fases presentes, microestructuras superficiales, superficies de fractura, corrosión, deformación, etc. Admite muestras de hasta 10 x 10 x 10 x 10 cm³. Dispositivo adicional Edax para el análisis de elementos. Detector de Si-Li. Dispersivo en energía con multicanal. Detecta desde el elemento Na en adelante. En condiciones especiales puede detectar C, N, O. Por el momento, medidas cualitativas.

GRUPO DE MICROSCOPIA ELECTRONICA. División Física del Sólido, SC, CNEA.

- . Microscopio electrónico Philips EM 300 (20-100 KV). Resolución última: 3.5 Å. Con: platina de alta resolución; platina geométrica; portamuestras calentador; portamuestras enfriador.
- . Metalizadora Edwards 12E. Para evaporación de films delgados de carbón, oro, etc.

GRUPO DE APOYO BASICO A PPFAE. CAC, CNEA

- 1) Hornos, hasta 1200°C.
- 2) Facilidades de tratamientos térmicos con vacío mejor que 10^{-6} de Hg.
- 3) Equipos instrumentados para medir resistividad a alta temperatura y en vacío.
- 4) Registradores varios.
- 5) Máquina para ensayos de tracción, Instron, de hasta 10.000 kg de carga, con horno para medir hasta 1000°C al aire.
- 6) Equipos LECO para medir p.p.m. de O, N e H en metales.
- 7) Durómetros y microdurómetros varios.
- 8) Facilidades para laminar (tubos y planos).
- 9) Equipo para ensayos de creep y explosión en tubos a 400°C.

DIVISION DAÑOS POR RADIACION. CAC, CNEA

1 Máquina para ensayos de tracción, Instron, de hasta 500 kg de capacidad y preparada para hacer ensayos a altas temperaturas, en aire.

1 Equipo para fusión zonal (bombardeo electrónico) para preparar aleaciones y purificar metales en vacío.

1 Equipo para efectuar tratamientos térmicos en vacío, consistente en un equipo de vacío, una cámara de cuarzo y un horno.

1 Equipo para mediciones de fricción interna a altas frecuencias, consistente en cristales piezoeléctricos de cuarzo, un sintonizador de frecuencias, voltímetros y amperímetros para altas frecuencias, amplificadores y voltímetros digitales.

Facilidades de irradiación a bajas temperaturas en el RA-1. Este dispositivo permite irradiar, con neutrones, a la temperatura de Nitrógeno líquido.

1 Equipo para medición de relajación de tensiones por curvado. Consiste en varios bloques de diferentes radios de curvatura en los que se pueden colocar probetas planas y en un horno con temperatura controlada.

1 Equipo para adquisición automática de datos Hewlett & Packard para dos canales.

1 Equipo para ensayos de creep uniaxiales completamente instrumentado.

1 Máquina para ensayos de fatiga marca MTS.

LABORATORIO DE SUPERFICIES

Departamento de Materiales (C.A. Constituyentes) CNEA

EQUIPO: ESCA 3 MARK II Vacuum Generator Scientific (Sussex, England).
Espectrómetro de electrones para análisis de superficies.

TECNICAS DISPONIBLES:

- 1) XPS ("X-Ray Photoelectron Spectroscopy")
- 2) UPS ("Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy")
- 3) AES ("Auger Electron Spectroscopy")

CARACTERISTICAS PRINCIPALES:

XPS: excitación Al $K\alpha_{1,2} = 1486,6$ eV

Mg $K\alpha_{1,2} = 1253,6$ eV

sin monocromador

UPS: excitación He I : 21,2 eV

He II: 40,8 eV

Red de difracción para separar las líneas

AES: Excitación cañón de electrones hasta 5 KeV, 2 mA.

ANALIZADOR:

Semiesférico, resolución 0,94 para la línea $4f_{7/2}$ del Au.

CAMARAS:

Consta de dos cámaras, una de análisis y otra de preparación de muestras, ambas con un vacío de 5×10^{-10} Torr. Cada cámara posee un cañón de iones de argón para limpiar la superficie de la muestra o para hacer análisis en función de la profundidad.

PORTAMUESTRAS:

Permite colocar hasta 3 muestras por vez, y controlar la temperatura desde nitrógeno líquido hasta 600°C. También es posible realizar tratamientos térmicos en la cámara de preparación hasta 1800°C por bombardeo electrónico.

"MAPPING" DE ELEMENTOS:

Mediante AES es posible determinar la distribución de elementos en la superficie.

TOMA DE ESPECTROS:

Se cuenta con una computadora PDP 8 para realizar la adquisición de datos y su posterior análisis.

GRUPO DE DIFUSION. División Fenómenos de Transporte, CAC, CNEA.

- . Hornos: Se dispone de hornos de precisión que llegan hasta los 1300°C. Se cuenta con un horno Brew para recocidos hasta 3000°C en vacío o en atmósfera controlada. Se dispone de un calibrador de termocuplas hasta 1000°C.
- . Torno de precisión Schaublin modelo 102.
- . Máquina de abrasión Micro Controle sistema CEA, tipo 2118. Permite seccionar capas delgadas del orden de 1 micrón de espesor.
- . Balanzas de precisión marca Mettler: 1 balanza semimicro modelo H16; 1 balanza micro modelo M5SA.
- . Espectrómetros de centelleo gamma marca Alfanuclear: 1 espectrómetro modelo RM; 1 espectrómetro modelo RM 72303.
- . Escalímetro Alfanuclear modelo S.T.P. para detector de flujo para radiación beta.
- . Multicanal Canberra modelo 8100 MCA con salida por teletipo y detectores de Si para radiación alfa.
- . Detectores de INa(Tl) marca Harshaw planos y de pozo.

DIVISION BAJAS TEMPERATURAS. CAB, CNEA.

- 1 Crióstato de dilución (rango de temperaturas desde 20 mK)
- 2 Crióstatos de Helio 3 (rango de temperaturas desde 350 mK)
- 1 Crióstato de Helio 4 con electroimán hasta 20 KOe
- 2 Crióstatos de Helio 4 para magnetómetro cuántico SQUID
- 1 Magnetómetro cuántico SQUID
- 1 Imán superconductor 40 KOe
- Puentes de resistencia, puente de inductancia mutua, amplificadores Lock-in, fuentes de corriente programables y otros equipos electrónicos básicos.
- 1 Computadora HP 9825 con graficador
- 1 Equipo con campana de evaporar

Con estos equipos se pueden efectuar mediciones de calores específicos, conductividades eléctricas y térmica, susceptibilidad alterna, magnetización.

Sección criogénicos. CAB

- 2 Máquinas Philips liquefactoras de aire
- 1 Máquina Philips con columna de destilación liquefactora de Nitrógeno.
- 1 Máquina Collins liquefactora de Helio
- 1 Detector de pérdidas Veeco
- Termos y demás equipo complementario

LABORATORIO DE CERAMICOS, Dto. de Física, Fac. de Ciencias Ex. y Nat., UBA.

El equipamiento del Lab. de Cerámicos tiene su parte más importante centrada en aquellos elementos que permiten el procesamiento de polvos cerámicos. Para ello se cuenta con:

- 1) Prensa hidráulica de efecto simple de hasta 20 Tn.
- 2) Horno tipo mufla; temperatura máxima: 1350°C
- 3) Idem, temperatura máxima: 1500°C.
- 4) Diversos hornos pequeños cilíndricos dens.gral. R.máx. 1100°C.
- 5) Matrices, balanzas, tamices, etc.
- 6) Controles "on-off" diversos hasta 1600°C.
- 7) 2 pulidoras para preparación de muestras.

Con respecto a instrumental electrónico, se cuenta con:

- 8) Puente de capacidades.
- 9) Electrómetro.
- 10) Medidor vectorial de impedancia.
- 11) Oscilador 0-10 MHz.
- 12) Osciloscopio con memoria.
- 13) 2 microscopios metalográficos con accesorios.

LABORATORIO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. Dto. de Física, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, UNBA.

- . Un espectrómetro de R.M.N. marca Varian con un electroimán de entrehierro mediano que provee hasta 1.4 T (actualmente limitado a 1.0 T) y que permite detectar resonancias de hidrógeno a 60 MHz (hoy 42 MHz) en muestras líquidas o sólidas de hasta 15 mm de diámetro. Posee también electrónica para observar cualquier núcleo observable, entre 2 y 16 MHz.
- . Un espectrómetro de R.M.N. de pulsos, construido en el laboratorio, para medición de tiempo de relajación de protones, a 16 MHz.
- . Un sistema de procesamiento digital de datos, por conversión A/D, de 12 K de memoria con palabras de 20 bits, para mejorar la relación señal/ruido de fenómenos transitorios, procesamiento de los datos obtenidos, con salida de teletipo, osciloscopio y graficador, con posibilidad de cómputo en lenguaje BASIC.
- . Un electroimán de 12" de 2.35 T, con entrehierro pequeño, destinado fundamentalmente a la R.M.N. de líquidos (Alta Resolución).
- . Un electroimán de 8" de 1 T con entrehierro semifijo (con piezas polares diversas), homogeneidad mediana para estudio de sólidos.
- . Un electroimán auxiliar de 4", de entrehierro continuamente variable de baja homogeneidad, campo máximo 1 T.

LABORATORIO DE EFECTO MÖSSBAUER. Facultad de Ingeniería, UBA

- . 1 Multicanal "Nuclear Data" de 512 canales.
- . 1 Fuente de alta tensión de 0 a 3000 V "Keithley".
- . 1 Osciloscopio "Tektronix" modelo 503.
- . 1 Impresora de cinta, para el multicanal, "Tally".
- . 1 Máquina de escribir eléctrica "IBM".
- . 1 Preamplificador "Ortec" PC 109.
- . 1 Amplificador "Spectra".
- . 1 Discriminador "RIDL".
- . 1 Generador de pulsos "Hewlett-Packard".
- . 1 Drive, compuesto de un parlante y un transductor.
- . 1 Equipo de electrónica para el drive.
- . 1 Graficador x-t "Hewlett-Packard".
- . 1 Recipiente de 29 litros para N líquido.
- . 2 Fuentes de alimentación de 12 y 24 V.

Equipo de enfriamiento ultrarápido

- . 1 Horno hasta 1200°C.
- . 1 Horno hasta 700°C.

El sistema de enfriamiento es por aplastamiento entre dos cilindros.

LABORATORIO DE FISICA APLICADA. Facultad de Ingeniería, UBA.

Poder termoeléctrico en líquidos:

- . Horno. Rango de temperaturas 20°C - 900°C ($\pm 2^{\circ}\text{C}$). Gradientes $\approx 4^{\circ}\text{C}/\text{cm}$; Zona de trabajo ≈ 10 cm.
- . Electrómetro Keithley, modelo 610 C.
- . Potenciómetro Leeds Northrup (7553-5 tipo 3).
- . Detector de cero (en continua) Leeds Northrup (N° de cat. 9834).
- . Equipo de vacío. Mecánica. Difusora. Vacuómetro.
- . Registrador de temperatura (RENCA). 2 escalas de temperatura 20°C - 600°C ($\pm 2^{\circ}\text{C}$); 600°C - 1200°C ($\pm 2^{\circ}\text{C}$).

Difusión en líquidos:

- . Horno Vac-Seal. Intervalo de temperaturas 20°C - 1200°C ($\pm 1^{\circ}\text{C}$); Zona de trabajo estable ≈ 10 cm.
- . Registrador de temperaturas (RENCA). 2 escalas 20°C - 500°C ; 500°C - 900°C ($\pm 2.5^{\circ}\text{C}$).
- . Potenciómetro "Jew" tipo PIA.
- . Equipo de vacío standard. Mecánica. Difusora. Vacuómetro.
- . Escalímetros.

LABORATORIO DE ESPECTROSCOPIA NUCLEAR E INTERACCIONES HIPERFINAS. Dto. de Física, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP.

- . Un sistema de correlaciones angulares diferencial γ - γ , (TDPAC).
- . Un sistema de correlaciones angulares diferencial $-\gamma$, (TDPAC).

En los equipos TDPAC se obtienen resoluciones del orden de 3 ns, que permiten determinar campos magnéticos h-f en el rango de 2 a 800 KG y gradientes del campo eléctrico en el rango de 1 a 500×10^{17} V/cm².

- . Un espectrómetro Mössbauer.

El espectrómetro permite medir campos hiperfinos que cumplen $B_{hf} > 5$ KG y $V_{zz} > 10^{17}$ V/cm².

- . Hornos para tratamientos térmicos hasta temperaturas del orden de 1100°C y para realizar mediciones hasta 600°C. También hay posibilidad de bajas temperaturas (N₂ líquido)

LABORATORIO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR. I.M.A.F, Córdoba.

Nuestro espectrómetro es básicamente similar a cualquier espectrómetro de Resonancia Magnética Nuclear Pulsado, con la única diferencia que en él puede ser variada la frecuencia de trabajo dentro de cierto rango. En este caso el rango es de 30 a 35 MHz.

En la actualidad, todas las partes básicas que lo componen son de construcción propia, en general en forma de plaquetas impresas de fácil reproducibilidad y costo razonablemente bajo; estamos en condiciones de proveer los planos necesarios para que sean reproducidas por algún otro laboratorio del país que necesite alguna de ellas.

Las características principales de cada componente son:

Programador de pulsos: Provee trenes de dos pulsos o bien una secuencia de pulsos repetidos, cuyas separaciones entre pulsos está dada en forma digital con un paso mínimo de 100 μ s y un paso máximo de 100 ms. La separación entre los pulsos puede ser comandada manualmente o bien que automáticamente aumnte en un dígito cada cierto número de secuencias. En este último caso, el instrumento provee de una tensión proporcional a la separación entre pulsos. Los anchos de los pulsos son variados en forma analógica y, en los trenes de dos pulsos, uno de ellos es igual o exactamente el doble del otro permitiendo por simple cambio de llaves, las secuencias $\pi/2-\tau-\pi/2-T$, $\pi/2-\tau-\pi-T$ ó $\pi-\tau-\pi/2-T$.

Transmisor de RF pulsado: Consiste en un oscilador pulsado de frecuencia variable de alta estabilidad (1 en 100.000 en una hora al menos) que provee pulsos de RF, de alta estabilidad en frecuencia y ancho pero en forma incoherente, a un amplificador de potencia. El conjunto provee, a una muestra de aproximadamente 2 cm³, pulsos de RF de hasta 1000 V de pico con una potencia instantanea de alrededor de 40 W y con un ancho de hasta 150 μ s.

Receptor de RF: Consiste en un preamplificador sintonizado de muy alta sensibilidad (capaz de recibir señales de 1 μ V o menos) y cuatro etapas sintonizadas. La ganancia total del equipo es de alrededor de 120 dB. El tiempo muerto del receptor luego de los pulsos de RF de excitación es de alrededor de 40 μ s. La detección se realiza mediante diodos y por lo tanto requiere calibración previa.

Boxcar: Está diseñado para promediar las señales de inducción nuclear de dos pulsos de RF en dos canales diferentes en sus elementos pasivos. Sin embargo, como elemento original respecto a otros boxcars comerciales, está diseñado de manera tal que las señales tanto del primero como las del segundo pulso tengan exactamente igual procesamiento, de manera de corregir errores debidos a desajustes de los elementos activos que procesan la señal en los distintos canales. Está provisto actualmente de una constante de tiempo de 10 s, pudiendo ser ésta fácilmente ampliada. Tanto las señales del 1° y 2° pulso salen ya corregidas de la tensión continua de la línea base, con lo que se puede decir que en este sentido actúa como un boxcar de 3 canales. Las señales a promediar pueden ser desde -5 hasta +10 V respecto a GND.

Control de temperatura de la muestra: Consiste en un baño termotatizado mediante un control proporcional de temperatura sensado por una termocupla. La temperatura mínima de trabajo actualmente es desde aproximadamente 140°K. En estos momentos se puede fijar la temperatura con una estabilidad del grado en media hora.

LABORATORIO DE RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR (Continuación)

Este equipo básico tiene a su vez añadido periféricos comerciales tales como sintetizador de frecuencias, contador de frecuencias, osciloscopio, voltímetro digital y graficador X-Y.