

248

DEFEITOS EM REDES CRISTALINAS DO COMPOSTO ZR₂Ni. *Camilla Zacché da Silva, Cássio Moura, Livio Amaral (orient.) (UFRGS).*

Tem-se buscado novas fontes de energia que se apresentem renováveis, menos danosas ao ambiente e economicamente viáveis. Vem-se usando como alternativa a energia nuclear, mas devemos aprimorar o material nelas utilizado para aumentar a vida útil das usinas. O revestimento do combustível nuclear é permanentemente bombardeado por várias radiações, principalmente por nêutrons provenientes da fissão nuclear, fazendo com que essa incidência danifique o material. Tenta-se obter um material que seja transparente aos nêutrons, para isto estuda-se a evolução do sistema frente à irradiação. O sistema utilizado neste projeto é o Zr₂Ni, pois ligas de Zr são muito utilizadas em revestimento de combustíveis nucleares, sendo comum observar precipitados destes elementos no interior das ligas. A interação da radiação com o material que a reveste origina vários tipos de defeitos na estrutura. O objetivo deste trabalho é estudar os defeitos causados pela incidência de uma partícula numa rede cristalina do composto Zr₂Ni e suas conseqüências. Para realizar este trabalho utilizamos o método de simulação de dinâmica molecular que consiste em resolver as equações de Newton acopladas para todas as partículas do sistema, o que permite determinar a evolução da microestrutura do material. Buscamos determinar a menor energia para que a incidência de um projétil cause um defeito permanente na rede cristalina, ou seja, a energia de deslocamento. Para tanto, atribuímos uma determinada velocidade a um átomo da rede e seguimos sua evolução. Com isto fazemos um mapeamento da energia de deslocamento em várias direções possíveis. Uma possibilidade de aplicação deste tipo de resultado é a possibilidade de orientação do material irradiado com o feixe incidente e o conseqüente aumento de sua vida útil. (PIBIC).