

8. Conclusões

Nesta pesquisa sobre as amostras de $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ e $(\text{Nb}_{1-x}\text{Zr}_x)\text{Fe}_2$ concluiu-se o seguinte:

Em $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$

Encontramos que este composto pseudobinário deve pertencer à fase de Laves, e pode ser sintetizado no forno de arco com atmosfera de gás de Argon, em lingotes de 3 gramas. Os lingotes fundidos apresentam a cor cinza brilhante para as diferentes composições, que vão desde o HfFe_2 até o HfCr_2 , passando pelas concentrações intermetálicas de $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ em $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8$ e $0,9$.

A estrutura cristalina a 300 K de temperatura das amostras mencionadas: HfFe_2 , $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,8}\text{Cr}_{0,2})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,7}\text{Cr}_{0,3})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,6}\text{Cr}_{0,4})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,4}\text{Cr}_{0,6})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,3}\text{Cr}_{0,7})_2$ e $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,2}\text{Cr}_{0,8})_2$, é hexagonal C14 na notação 'strukturbericht'. Pensamos que esta estrutura também é correta para as amostras $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1})_2$ e HfCr_2 , que resultaram mudadas depois do tratamento térmico para uma estrutura diferente a da C14, mas, apesar disso, consideramos a amostra $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1})_2$ em nossas experiências.

Já o tratamento térmico aplicado a nossas amostras não parece necessário, porque a taxa de esfriamento no forno de arco não é prejudicada na formação das microestruturas. Constatamos que nossas amostras de $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$ puderam suportar tratamento térmico de 1000 °C por sete dias, sem manifestar deformação notável da estrutura cristalina, senão apenas uma ligeira modificação dos parâmetros de rede.

Por outro lado, verificamos que o comportamento magnético de nossas amostras segue um comportamento parecido com o da amostra: $\text{Zr}(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)_2$ [8].

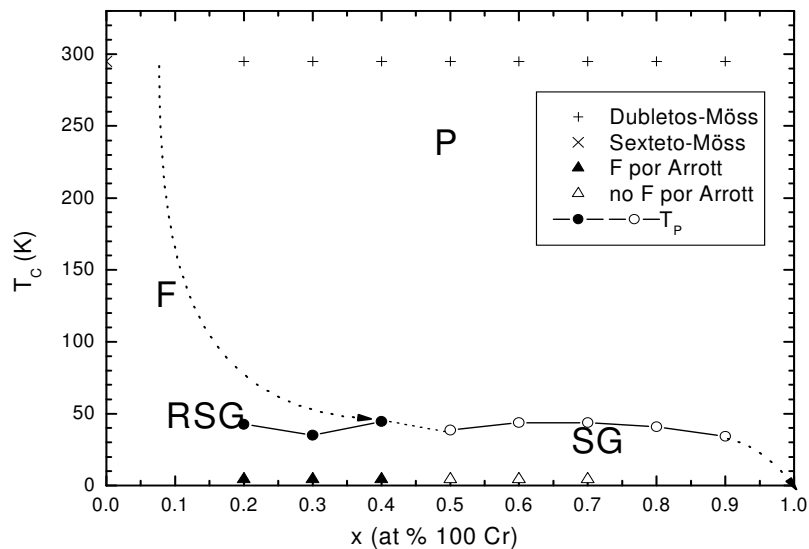
Em nossas amostras, as que representam o gráfico da temperatura versus composição x % de Cr (figura 8.1), à temperatura de 300 K, só apresentam duas fases. A Ferromagnética (F) para a amostra HfFe_2 já conhecida e a $\text{Hf}(\text{Fe}_{0,9}\text{Cr}_{0,1})_2$; a Paramagnética (P) para as demais amostras:

$\text{Hf}(\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.2})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.7}\text{Cr}_{0.3})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.6}\text{Cr}_{0.4})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.4}\text{Cr}_{0.6})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.3}\text{Cr}_{0.7})_2$ e $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.2}\text{Cr}_{0.8})_2$. Quando abaixamos a temperatura, a zona da fase Ferromagnética tende a crescer em largura afetando a amostra $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.2})_2$ com menor quantidade de Fe. Por isso a zona Paramagnética irá decrescendo em largura até os 44 K, valor onde aparece uma zona de Spin Glass debaixo da zona Paramagnética. Essa nova zona de Spin Glass é bem notável para as amostras de $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.6}\text{Cr}_{0.4})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.4}\text{Cr}_{0.6})_2$, $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.3}\text{Cr}_{0.7})_2$ e $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.2}\text{Cr}_{0.8})_2$, o que se estende até as amostras $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.8}\text{Cr}_{0.2})_2$ e $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.7}\text{Cr}_{0.3})_2$, as quais também se encontram na zona Ferromagnética (SG reentrante).

A amostras $\text{Hf}(\text{Fe}_{0.1}\text{Cr}_{0.9})_2$ e HfCr_2 deverão, por sua parte, ser Super-paramagnéticas. Encontramos com efeito, que todas as amostras não apresentam a esperada histerese na magnetização, devido as técnicas e equipamentos utilizados.

Figura 8.1

Diagrama de fases magnéticas da fase de Laves $\text{Hf}(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2$. Os círculos são as temperaturas do pico máximo T_p , no gráfico da suscetibilidade.AC. As cruzes e aspas são as temperaturas dos dubletos e sextetos da espectroscopia Mössbauer. Os triângulos são devidos aos diagramas de Arrott, com a temperatura T_c da liga HfFe_2 a 600K.



Em (Nb_{1-x}Zr_x)Fe₂

Pelos difratogramas das amostras confirmamos a obtenção de amostras com a estrutura C14, estrutura esperada para as composições: NbFe₂, (Nb_{0.9}Zr_{0.1})Fe₂, (Nb_{0.8}Zr_{0.2})Fe₂, (Nb_{0.7}Zr_{0.3})Fe₂, (Nb_{0.6}Zr_{0.4})Fe₂ e (Nb_{0.5}Zr_{0.5})Fe₂.

A temperatura alcançada na fundição das amostras é um fator importante e determinante na formação de sua estrutura cristalina. Neste caso, a temperatura de fusão deve ser alta com corrente elétrica acima de 80 A no forno de arco, à temperatura de fusão do NbFe₂ em torno de 1627 °C e do ZrFe₂ por redor de 1673 C. Por tanto, um posterior tratamento térmico de 1000 °C é recomendável.

Fizeram-se medições de espectroscopia Mössbauer, com alto campo magnético aplicado. Os espectros Mössbauer das amostras, obtidos à temperatura de 4.2 K, e os campos magnéticos aplicados de 6 e 12 T, além de nulo, sugerem que o composto NbFe₂ se encontra num balanço delicado, coexistindo em fases ferromagnéticas e antiferromagnéticas. Nesta amostra, o campo magnético hiperfino no sítio cristalino 2a é 0 T, resultando em um antiferromagnético débil por sua coexistência com uma fase ferromagnética, que, mais tarde, se manifesta quando se acrescenta o valor do campo aplicado. Por isso, a linha que se traça entre os pontos dos campos magnéticos hiperfinos no sítio 2a, tanto de 0 a 6 T, como de 6 a 12 T (de campo magnético aplicado) não forma uma reta.

Nos compostos (Nb_{0.8}Zr_{0.2})Fe₂ e (Nb_{0.7}Zr_{0.3})Fe₂, a substituição de Nb por Zr deve rapidamente estabilizar o ferromagnetismo débil, convertendo-se para o estado antiferromagnético. Tais amostras deveriam ser antiferromagnéticas, mas denotam a presença ferromagnética débil, pois no sítio 2a o campo magnético hiperfino é maior do que 1 T; mas a reta que une os campos magnéticos hiperfinos, no sítio 2a, de 0 a 6 T e de 6 a 12 T (de campo magnético aplicado) não se dobra muito.

O composto (Nb_{0.6}Zr_{0.4})Fe₂ é antiferromagnético, posto que sem campo aplicado o valor do campo magnético hiperfino é 0,45(42) T. A reta

que passa pelos valores dos campos magnéticos hiperfinos do sítio 2a, desde 0 até 12 T (de campo magnético aplicado), não se flexiona demais e segue contínua. Certamente, este fato pode confirmar que os átomos de Fe de uma célula unitária que ocupam o sítio cristalográfico 2a estão centrados e simetricamente distantes dos dois planos de átomos de Fe 6h. Sendo que tais planos têm seus átomos de Fe com orientação oposta de spin, motivo pelo qual são planos antiferromagnéticos. Logo, quando aplicamos os campos magnéticos elevados, o campo hiperfino varia em relação ao campo aplicado; então, comparando o comportamento do campo hiperfino em relação ao campo aplicado para os átomos Fe(6h) e Fe(2a), assim, determinamos que os átomos Fe(2a) possuem momento magnético nulo. Este comportamento é quase idêntico ou proporcional ao campo aplicado.

Finalmente a amostra $(\text{Nb}_{0.5}\text{Zr}_{0.5})\text{Fe}_2$ é novamente ferromagnética, por ter menos de 4 T de campo magnético hiperfino no sítio 2a, embora conviva com certa fase antiferromagnética. Por isso, a reta que passa através dos valores de campo magnético hiperfino do sítio 2a, tanto de 0 a 6 T como de 6 T a 12 T (de campo magnético aplicado), sofre uma leve flexão significativa.