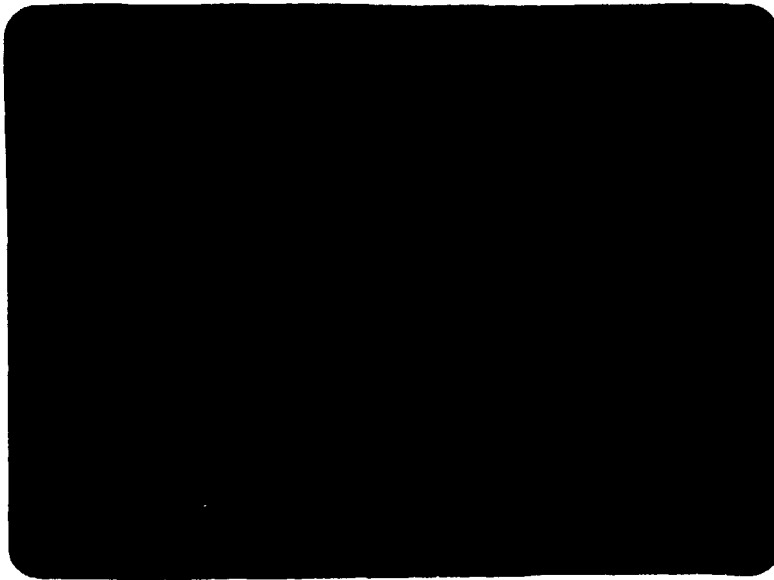




SECRETARIA DE PLANEJAMENTO DA PRESIDÊNCIA DA REPUBLICA
CONSELHO NACIONAL DE DESENVOLVIMENTO CIENTÍFICO E TECNOLÓGICO



INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

Attention Microfiche User,

The original document from which this microfiche was made was found to contain some imperfection or imperfections that reduce full comprehension of some of the text despite the good technical quality of the microfiche itself. The imperfections may be:

- missing or illegible pages/figures
- wrong pagination
- poor overall printing quality, etc.



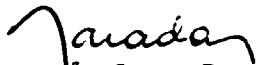
We normally refuse to microfiche such a document and request a replacement document (or pages) from the National INIS Centre concerned. However, our experience shows that many months pass before such documents are replaced. Sometimes the Centre is not able to supply a better copy or, in some cases, the pages that were supposed to be missing correspond to a wrong pagination only. We feel that it is better to proceed with distributing the microfiche made of these documents than to withhold them till the imperfections are removed. If the removals are subsequently made then replacement microfiche can be issued. In line with this approach then, our specific practice for microfiching documents with imperfections is as follows:

1. A microfiche of an imperfect document will be marked with a special symbol (black circle) on the left of the title. This symbol will appear on all masters and copies of the document (1st fiche and trailer fiches) even if the imperfection is on one fiche of the report only.
2. If imperfection is not too general the reason will be specified on a sheet such as this, in the space below.
3. The microfiche will be considered as temporary, but sold at the normal price. Replacements, if they can be issued, will be available for purchase at the regular price.
4. A new document will be requested from the supplying Centre.
5. If the Centre can supply the necessary pages/document a new master fiche will be made to permit production of any replacement microfiche that may be requested.

The original document from which this microfiche has been prepared has these imperfections:

- missing page/figures numbered: 6.
- wrong pagination
- poor overall printing quality
- combinations of the above
- other

INIS Clearinghouse
IAEA
P. O. Box 100
A-1400, Vienna, Austria

1. Publicação nº <i>INPE-2813-RPE/438</i>	2. Versão	3. Data <i>Julho, 1983</i>	5. Distribuição <input type="checkbox"/> Interna <input checked="" type="checkbox"/> Externa <input type="checkbox"/> Restrita
4. Origem <i>DTE/DCT</i>	Programa <i>MATERIAIS</i>		
6. Palavras chaves - selecionadas pelo(s) autor(es) <i>CRESCIMENTO DE CRISTAIS</i> <i>Pb_{1-x}Sn_xTe</i> <i>HOMOGENEIDADE DA COMPOSIÇÃO</i>			
7. C.D.U.: <i>539.2</i>			
8. Título <i>DETERMINAÇÃO DO PERFIL DE COMPOSIÇÃO EM LIGAS BINÁRIAS ISOMORFAS</i>		10. Páginas: <i>08</i>	
		11. Última página: <i>07</i>	
9. Autoria <i>C. Ying An</i> <i>I.N. Bandeira</i>		12. Revisada por  <i>Ronald Ranvaud</i>	
Assinatura responsável 		13. Autorizada por  <i>Nelson de Jesus Parada</i> Diretor Geral	
14. Resumo/Notas <i>Devido aos efeitos de segregação, associados com fenômenos de difusão e/ou convecção, monocristais de ligas pseudo-binárias não apresentam uma composição longitudinal homogênea. Apresenta-se um processo que permite a determinação do perfil de composição, em função da densidade, de ligas isomorfas do tipo A_{1-x}B_x.</i>			
15. Observações			

ABSTRACT

The inhomogeneity along the growth axis of the pseudo-binary alloys is due to the segregation of the solute which will be mixed in the melt due to convective and diffusive flows. A process for determination of the exact composition profile by measurements of the crystal density, for alloys of the type $A_{1-x}B_x$ is shown.

No crescimento de monocristais de ligas pseudo-binárias de sais de chumbo é de fundamental importância a determinação de sua composição, isto é, das possíveis diferenças entre as energias do intervalo proibido ao longo do cristal. No caso da liga de $Pb_{1-x}Sn_xTe$, utilizada para fabricação de detectores para o infravermelho termal, isso implica o conhecimento da porcentagem de estanho ao longo do eixo longitudinal do cristal. Devido a efeitos de segregação, associados a fenômenos de difusão e/ou convecção, o cristal apresenta uma concentração de estanho conforme mostrado na Figura 1.

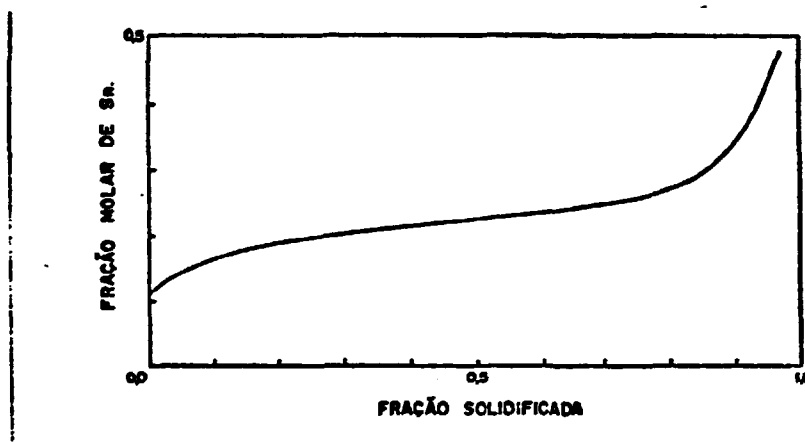


Fig. 1 - Distribuição de Sn ao longo de um monocristal de $Pb_{1-x}Sn_xTe$.

O método tradicional para a obtenção da concentração de estanho é o de microsondagem, que implica no acesso a equipamentos caros e sofisticados. Um método alternativo para sua determinação é o de medida da densidade do cristal com uma balança de alta precisão. Nesse trabalho, chega-se a equação exata que relaciona a densidade com a concentração resultando em determinações muito mais confiáveis da energia do intervalo proibido.

A expressão que relaciona a composição x da liga isomorfa $A_{1-x}B_x$ em função de sua densidade ρ é obtida a partir das massas atômicas M_A e M_B , e das densidades ρ_A e ρ_B de seus elementos constituintes. A massa correspondente a um mol de átomos do elemento A será a sua massa atômica

massa M_A , e a massa correspondente a um certo número n_A de átomos é dada por $m_A = n_A M_A / N$, onde $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ é o número de Avogadro, obtendo-se uma expressão semelhante para o elemento B. Como $n_A x = n_B (1 - x)$, onde x é a fração molar de B, tem-se:

$$\frac{m_A}{m_B} = \frac{(1-x) M_A}{x M_B} \quad (1)$$

Por outro lado, a densidade da liga é dada por:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_A + m_B}{V_A + V_B} \quad (2)$$

onde m_A , m_B e V_A , V_B são, respectivamente, as massas e os volumes dos elementos constituintes. Substituindo-se a Equação 1 na Equação 2, obtém-se:

$$x = \frac{\rho_A - \rho}{\rho_A \left(1 - \frac{M_B}{M_A}\right) - \rho \left(1 - \frac{\rho_A M_B}{\rho_B M_A}\right)} \quad (3)$$

onde ρ_A e ρ_B são as densidades dos elementos A e B.

Essa equação permite determinar a composição x em função da densidade ρ da liga, e aquelas ligas que satisfazem a condição $\rho_A M_B = \rho_B M_A$, terão suas densidades variando linearmente com a composição. Long e Schmidt (1970) utilizaram a equação linear:

$$x = 3,6280 - 0,44924 \rho (\text{g/cm}^3) \quad (4)$$

para a liga pseudo-binária $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, obtida por extrapolação a partir dos pontos $x = 0$ e $x = 1$.

A Equação 4 está de acordo com os resultados experimentais de Blair e Newnham (1961) que obtiveram uma relação linear entre a densidade e a composição dessas ligas.

A Tabela 1 apresenta alguns resultados para diversas ligas, e os gráficos de composição versus densidade, obtidos através da Equação 3, para $Pb_{1-x}Sn_xTe$ e $Hg_{1-x}Cd_xTe$ encontram-se na Figura 2, onde se pode observar a não-linearidade do $Pb_{1-x}Sn_xTe$.

TABELA 1

DENSIDADE E MASSA ATÔMICA PARA ALGUMAS LIGAS DO TIPO $A_{1-x}B_x$

LIGA	ρ_A (g/cm ³)	M_A	ρ_B (g/cm ³)	M_B	$\rho_A M_B$	$\rho_B M_A$	Δ (%)
$Au_{1-x}Ag_x$	19,30	197,00	10,53	107,90	2082,47	2074,41	0,39
$Ni_{1-x}Mg_xO$	6,67	74,71	3,58	40,31	268,87	267,46	0,52
$Hg_{1-x}Cd_xTe$	8,076	328,19	5,850	240,00	1938,24	1919,91	0,95
$Pb_{1-x}Sn_xTe$	8,164	334,79	6,480	246,29	2010,71	2169,44	7,32
$Cu_{1-x}Pt_x$	8,96	63,54	21,45	195,10	1748,10	1362,93	22,00

Assim, o método utilizado por Long e Schmidt (1970) para determinação de composição do $Hg_{1-x}Cd_xTe$ apenas por coincidência fornece uma boa aproximação dos resultados experimentais ($\Delta = 0,95\%$, onde Δ é a diferença percentual entre $\rho_A M_B$ e $\rho_B M_A$), uma vez que a equação correta seria:

$$x = \frac{8,0760 - \rho(\text{g/cm}^3)}{2,1702 + 0,0095 \rho(\text{g/cm}^3)} \quad (5)$$

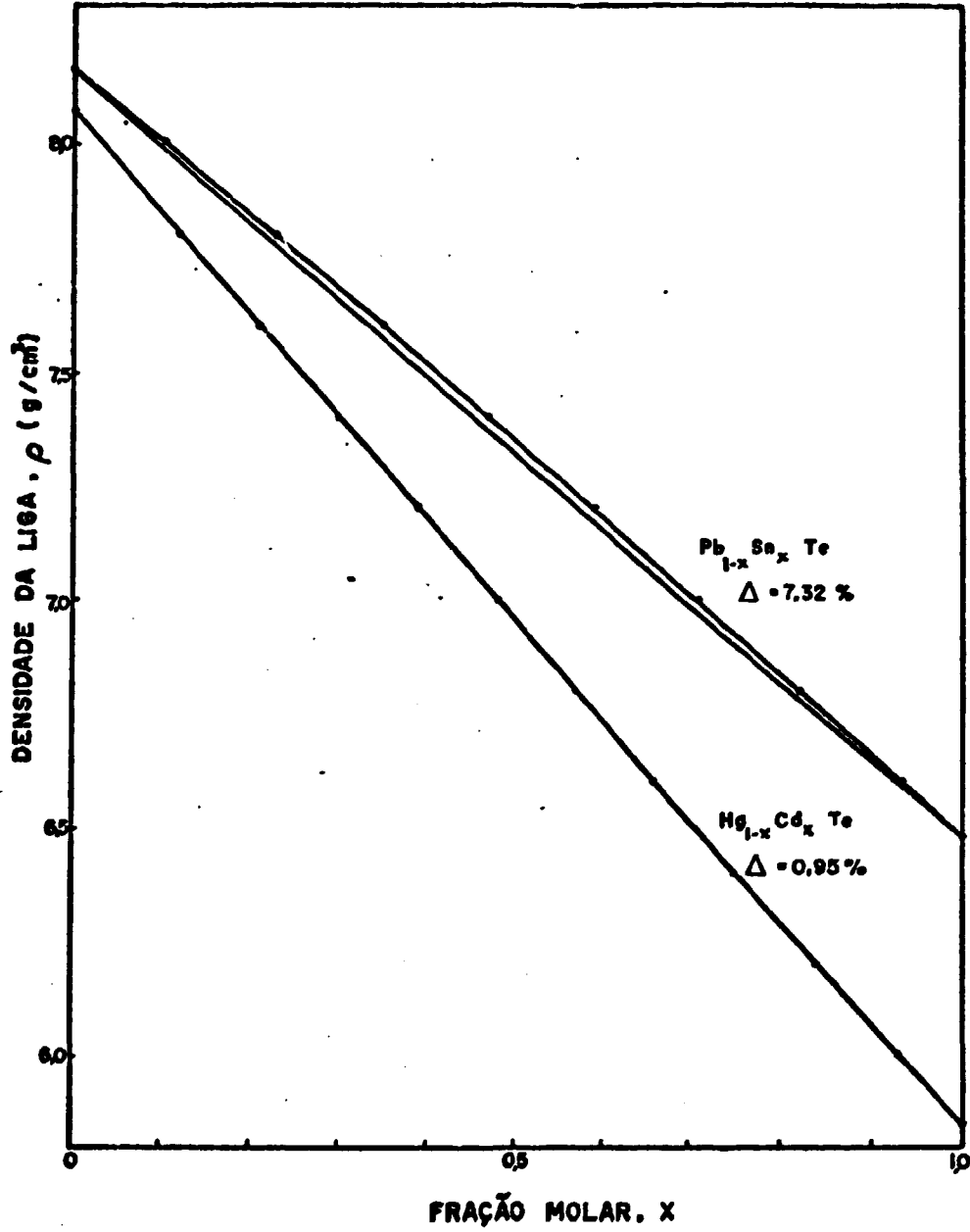


Fig. 2 - Densidade em função da composição para as ligas $Pb_{1-x}Sn_xTe$ e $Hg_{1-x}Cd_xTe$, utilizando a Equação 3, em comparação com a distribuição linear.

Para o $Pb_{1-x}Sn_xTe$ existe em $x = 7,32\%$, o que torna a simples interpolação de uma reta entre $x = 0$ e $x = 1$ um método pouco preciso. Para essa liga, a composição é dada pela equação não-linear:

$$x = \frac{8,1640 - \rho(\text{g/cm}^3)}{2,1581 - 0,0732 \rho(\text{g/cm}^3)} \quad (6)$$

Dessa maneira, o método de interpolação linear é válido apenas para ligas onde $\rho_A M_B = \rho_B M_A$, e a Equação 3 é válida para qualquer liga binária.

Uma vez medida a densidade de várias fatias cortadas longitudinalmente ao longo do cristal, pode-se através da Equação 3 determinar o perfil de concentração.

O processo utilizado para medir a densidade é baseado no princípio de Arquimedes. A amostra de densidade ρ a ser determinada, suspenso em um prato perfurado previamente zerado, é pesada fora e dentro de um líquido de densidade ρ_L conhecida, sendo ρ obtido através da equação:

$$\rho = \rho_L \frac{M}{M - M'} \quad (7)$$

onde M e M' são as massas da amostra medidas fora e dentro do líquido, respectivamente.

Alguns cuidados devem ser tomados: a amostra e o líquido devem estar em equilíbrio térmico e a temperatura constante, e o líquido deve possuir baixa volatibilidade, alta densidade e não reagir quimicamente com amostra.

Com este método têm-se obtido resultados plenamente satisfatórios para a composição do $Pb_{1-x}Sn_xTe$, desde que se utilize a Equação 3 em vez de uma simples interpolação linear entre $x = 0$ e $x = 1$.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BLAIR, J.; NEWNHAM, R. In: *Metalurgy of Element and Compound Semiconductors*. New York, Wiley (Interscience), 1961. v. 12, 393 p.
- LONG, D.; SCHMIT, J.L. Mercury-Cadmium Telluride and Closely Related alloys. In: *Semiconductors and Semimetals*. Ed. by Willardon R.K. e Beer A.C. New York, Academic Press, 1970. v. 5, 243 p.