

CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS POR MICRODIFRAÇÃO DE ELÉTRONS*Giulliano Rocco Aloise e Paulo Fernando Papaleo Fichtner.* (Departamento de Metalurgia, Escola de Engenharia - UFRGS)

A microdifração de elétrons é uma técnica que possibilita a determinação da estrutura cristalina e de seus defeitos e/ou campos de deformação elástica em regiões de escala micro e nanométricas. O principal instrumento para a aplicação das técnicas de microdifração de elétrons são os microscópios eletrônicos de transmissão de última geração (e.g o JEM do Centro de Microscopia Eletrônica da UFRGS). No entanto, a informação obtida através das técnicas de microdifração de elétrons não é de fácil interpretação sem o auxílio de programas de simulação de estruturas, através dos quais o padrão da difração das mesmas é calculado e comparado com os dados experimentais. O presente projeto tem por objetivo desenvolver a aplicação de cálculos de microdifração de elétrons, possibilitando, assim, seu emprego sistemático em diversos projetos de pesquisa atualmente em desenvolvimento. Como caso modelo para o presente estudo, consideraremos inicialmente materiais simples como o Silício e o Alumínio. Para tais casos, os padrões de difração de feixe convergente e de difração por área selecionada serão calculados para direções correspondentes a eixos cristalográficos $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$, e os resultados dos cálculos serão comparados com dados experimentais. Trata-se de um trabalho básico que visa potencializar o emprego da infra-estrutura experimental já existente na UFRGS, proporcionando a implantação de uma infra-estrutura de tratamento de dados experimentais de fundamental importância para a microscopia eletrônica.