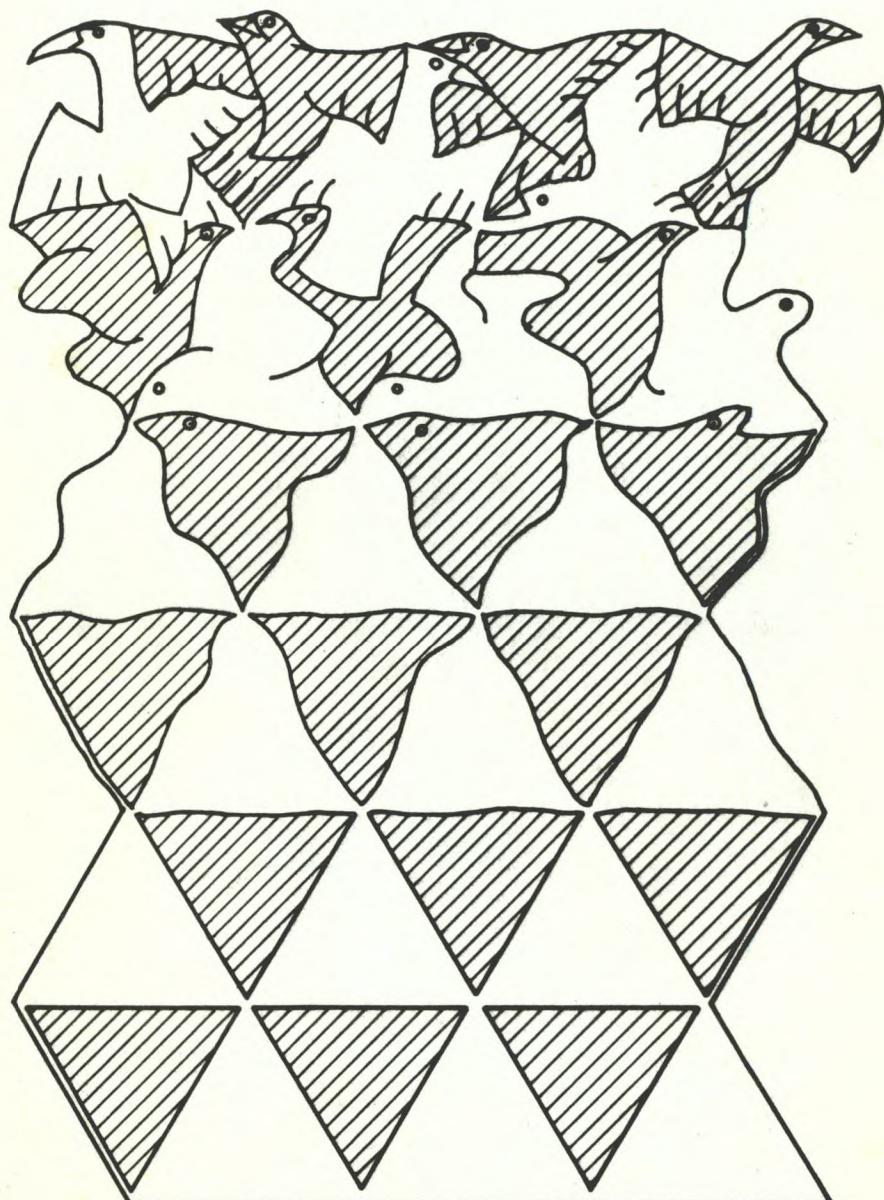


# X ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA



CAXAMBU / MG, 05 A 08 DE MAIO DE 1987

SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

**X ENCONTRO NACIONAL  
DE FÍSICA  
DA MATÉRIA CONDENSADA**

**PROGRAMA  
E  
RESUMOS**

## X ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

### Comissão Organizadora:

Prof. Antônio Martins Iqueirudo Neto (IFUSP) - Coordenador

Prof. Carlos Alberto dos Santos (UFGRN)

Prof. Geraldo Alexandre Barbosa (UFMG)

Prof. Nelson Studart Filho (UFPE)

Prof. Sérgio Gama (UNICAMP)

### Fontes Patrocinadoras:

FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos

FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

FAPENIG - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais

CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

MANGELS INDUSTRIAL S/A

De Cambuquira a Caxambu: Dez anos de  
Encontros de Física da Materia Condensada

Chegamos ao décimo Encontro Nacional de Física da Materia Condensada (ENFMC). Idealizado, em 1977, como um fórum de comunicação e discussão de pesquisadores das áreas de Mecânica Estatística e Física de Sólidos, o ENFMC vem sendo realizado anualmente, desde 1978, com o patrocínio da Sociedade Brasileira de Física e o apoio das entidades financeiras oficiais. O exemplo e pioneirismo destes pesquisadores convidaram a realização de outros encontros de diferentes áreas da Física. Constatamos um considerável crescimento tanto no número de participantes quanto na variedade dos campos abordados. Houve também um acentuado e bem-vindo crescimento na participação de estudantes de pós-graduação. Uma característica atual do ENFMC é a multidisciplinaridade, com os Grupos de Trabalho (GT) abrangendo tópicos que se espalham da Biofísica à Física de Semicondutores, da Ótica à Mecânica Estatística, da Ciência dos Materiais à Física Atômica e Molecular. É evidente que o intercâmbio entre pesquisadores de várias áreas pode possibilitar uma visão mais abrangente das áreas afins.

A organização, tamanho e abrangência dos ENFMCs têm provocado intensa polêmica na comunidade. Há os que sonham em vê-lo dividido para manter um caráter mais informal; há os que querem transformá-lo em uma grande conferência com apresentação formal de trabalhos; há os que querem a sua expansão indefinida em termos de número de participantes. Em geral, estes temas têm sido tratados no relatório das discussões da Assembleia Geral. Na comemoração dos dez anos de ENFMC, a Comissão Organizadora (CO) planejou uma sessão plenária onde, no mesmo tempo que será apresentado o levantamento da Física da Materia Condensada no país, será procedida uma Avaliação dos ENFMCs. Aí, esperamos que sejam encaminhadas sugestões concretas de reformulação do Encontro para a devida deliberação da Assembleia Geral.

A CO do XENFMC necessita esclarecer os colegas quanto ao número de participantes financiados pelo Encontro. Apoiada por manifestação inequívoca da Assembleia Geral do IX ENFMC, a CO planejou em meados de julho passado (em plena euforia do Plano Cruzado), uma reunião prevendo uma participação da ordem de 700 colegas. Com este objetivo, foram solicitados os recursos e foi definido um local com infra-estrutura suficiente para abrigar este número de participantes. Com o recrudescimento da inflação, o orçamento do XENFMC ficou seriamente afetado, de modo que a CO, baseada em sugestões dos Coordenadores dos GT, foi obrigada a realizar cortes da ordem de 40% no núme-

ro de participantes custeados pelo Encontro. Desta forma, a participação de inúmeros colegas só pode ser assegurada através do financiamento pela sua Instituição de origem. Acreditamos que este fato possa contribuir para as discussões sobre o financiamento do XENFMC.

A novidade do XENFMC é a introdução de uma sessão permanente de posters. Aquelas que vão apresentar uma Comunicação Oral também foram encorajados a montar o poster de sua contribuição. Solicitamos aos colegas que afixem junto ao poster o nº de seu quarto ou outro meio de identificação para facilitar a localização do expositor. As sessões de comunicação oral serão bastante rígidas em relação à ordem e ao tempo disponível para apresentação (total de 20 minutos), de modo que o participante possa conhecer o seu próprio roteiro pelos CT.

Os ENFMCs recentes foram palco de discussões sobre necessidade, viabilidade e abrangência de um Laboratório de Radiação Sincrotrônica. Atualmente, já instalado em Campinas, o Laboratório Nacional de Luz Sincrotron (LNLS) é uma realidade. O seu Diretor-Presidente, Prof. Cylum E.T. Gonçalves da Silva, proferirá palestra em sessão plenária sobre o atual estágio e perspectivas do LNLS.

No ano passado, a Sociedade Americana de Ótica (OSA) concedeu o Prêmio Max Born ao Prof. Herch M. Nussenzweig, da PUC-RJ, em reconhecimento a suas "contribuições destacadas e valiosas à teoria do espalhamento Raman e às teorias do arco-íris e da auréola". Prof. Nussenzweig apresentará no Encontro a mesma palestra que proferiu quando da outorga do prêmio. O Encontro Internacional de Física Estatística, STATPHYS, será realizado no Brasil em 1989. Para discutir a organização deste importante evento foi convidado o Prof. Constantino Tsallis, do CBPF. Recentemente, a comunidade de Semicondutores no Brasil tem desenvolvido esforços no sentido de implantar modernos equipamentos de crescimento de estruturas artificiais de semicondutores. O XENFMC reunirá, numa mesa redonda, representantes dos diversos grupos instalados no país para debater as técnicas empregadas e o atual estágio de seus laboratórios. Teremos um total de 19 palestras convidadas cobrindo um amplo espectro que vai da Biogênese aos mostradores de cristais líquidos.

A CO do XENFMC espera que este encontro, como aqueles que o precederam, possa contribuir para um maior intercâmbio entre os pesquisadores e dê continuidade à busca de uma melhor organização, sem inibir a informalidade das discussões e o fácil acesso e interação dos estudantes com pesquisadores mais experientes.

A COMISSÃO ORGANIZADORA

SIGLAS DOS GRUPOS DE TRABALHO

AMO = Materiais Amorfos  
AOI = Física Atômica e Molecular  
BIO = Biofísica  
CRI = Cristalografia  
DEF = Defeitos, Crescimento e Caracterização de Cristais  
EST = Física Estatística e Fenômenos Críticos  
INS = Instrumentação  
LIQ = Cristais Líquidos  
MAG = Magnetismo  
MAT = Ciência dos Materiais/Propriedades Mecânicas  
MET = Metais e Ligas  
OTI = Ótica  
RES = Ressonância Magnética  
SEM = Semicondutores

**PROGRAMAÇÃO DAS ATIVIDADES  
DO X ENFMC**

### PROGRAMAÇÃO DAS ATIVIDADES X ENFMC

HORÁRIO	QUARTA	QUINTA	SEXTA
8:00 e 10:00	COMUNICAÇÕES DE ST	COMUNICAÇÕES DE ST	COMUNICAÇÕES DE ST
10:15 e 12:15	COMUNICAÇÕES DE ST	COMUNICAÇÕES DE ST	COMUNICAÇÕES DE ST
12:30 e 14:00	ALMOÇO	ALMOÇO	ALMOÇO
14:00 e 15:00	ATO 1; RES 4; OT 17; LIO-CRI - 11; EST 16	ATO 2; OT 16; INS 19 BIO-CRI 10; SEM 14	DEF 6; SEM 13; EST 17
15:00 e 16:00	SEM 12; LIQ 20	AM 03; EST 16	BIO 5; OT 18
16:00 e 18:00	PAINEL	PAINEL	PAINEL
20:00	ESTÁGIO ATUAL DO LNLS	AVALIAÇÃO DOS ENFMC	ASSEMBLEIA

DISTRIBUIÇÃO DE SALAS ENTRE OS GRUPOS DE TRABALHO

Sala	4ª feira	5ª feira	6ª feira
01	OTI	OTI	OTI
02	EST	EST	EST
03	SEM	SEM	SEM
04	ATO	ATO	ATO
05	MET	MET	MET
06	CRI	CRI	BIO
07	BIO	LIQ	-
08	LIQ	AMO	AMO
09	MAT	MAT	MAT
10	MAG	MAG/RES	RES
11	OEF	OEF	-
12	INS	INS	INS

## PALESTRAS CONVIDADAS E MESAS REDONDAS

### PALESTRAS CONVIDADAS

- AfO - 1. E.Ludeña (IVIC) - Funcionais de Densidade  
4ª feira, 14:00 horas - sala 04
2. M.Trsic (IFQSCar) - Funções de Base Universais  
5ª feira, 14:00 horas - sala 04
- AMO - 3. E.Nassif (B.Aires) - Determinação de S(q) em Amorfos  
5ª feira, 15:00 horas - sala 08
- RES - 4. M.A.B.Araújo (UFCE) - Ressonância Magnética de Núcleos Orientados  
e suas Aplicações ao Magnetismo  
4ª feira, 14:00 horas - sala 10
- BIO - 5. R.Ferreira (UFPE) - Biogênese como um Problema de Física  
6ª feira, 15:00 horas - sala 06
- DEF - 6. M.A.Aegerter (IFQSCar) - Aerogéis  
6ª feira, 14:00 horas - sala 11
- DTI - 7. S.Cunha (UFRGS) - Espectroscopia Raman não Linear  
4ª feira, 14:00 - sala 01
8. J.R.R.Leite (UFPE) - Conjugação de Fases  
5ª feira, 14:00 horas - sala 01
9. H.M.Nussenzveig (PUC/RJ) - Difração como Tunelamento  
6ª feira, 15:00 horas - sala 01
- BIO/- 10.G.Albertini (Itália) - Difração de Raios X em Cristais Líquidos e  
CRI Sistemas Biológicos  
5ª feira, 14:00 horas - sala 06
- LIQ/- 11.H.d'Expert (França) - EXAFS e Catalizadores  
CRI 4ª feira, 14:00 horas - sala 08
- SEM - 12.G.E.Merques (UFSCar) - Estruturas Eletrônicas em Heteroestruturas  
de Semicondutores Semimagnéticos  
4ª feira, 15:00 horas - sala 03
- 13.Mesa Redonda - Crescimento e Caracterização de Semicondutores: Re-  
centes Progressos no País  
Part.: A.C.Oliveira (UFMG); J.R.Leite (IFUSP); M.M.G.Carvalho (UNI-  
CAMP) e H.C.Basso (IFQSCar)  
6ª feira, 14:00 horas - sala 03
- 14.L.G.Ferreira (IFUSP) - Estabilidade de Ligas  
5ª feira, 14:00 horas - sala 03
- EST - 16.F.C.Alcaraz (UFSCar) - Invariância Conforme e Fenômenos Críticos  
4ª feira, 14:00 horas - sala 02
- 17.C.Tsallis (CBPF) - STATPHYS, a mais importante conferência mun-  
dial de Física Estatística: em 1989, no Brasil'  
6ª feira, 14:00 horas - sala 02

18. Kyoung-An Cheo ( ) - Física de Supercondutores à Temperatura  
Finita  
5ª feira, 15:00 horas - sala 01

INS - 19. L. Donadío (CNPq) - PADCT e o Desenvolvimento da Instrumentação  
no Brasil  
5ª feira, 14:00 horas - sala 12

LIQ - 20. A.P. Mammino (UNICAMP) - Mostradores de Cristais Líquidos  
4ª feira, 15:00 horas - sala 08

MESAS REDONDAS PROGRAMADAS

1. SEM 13
2. LIQ 21 - A Transição de Fase Nêmatica-Isotrópica em Liotrópicos  
Part.: - T.R. Taylor (UFSC); L.Q. do Amaral (IFUSP) e M.B.L. Santos (UFMG)  
5ª feira, 16:30 horas - sala 07
3. LIQ 22 - Colestéricos Liotrópicos  
Part.: - J.A. Vanin (IQUSP); A.M. Figueiredo Neto (IFUSP) e M.E. Halene (IFUSP)  
6ª feira, 16:30 horas - sala 07

**RESUMOS  
DOS  
TRABALHOS**

**MATERIAIS AMORFOS**

**Coord.: - Reiko Sato Turtelli (UNICAMP)**

**AMO/8:00/5A.F** NOVA TEORIA PARA DETERMINAÇÃO DA MAGNETOSTRICCÃO  $\lambda_s$  POR ROTAÇÃO DA MAGNETIZAÇÃO POR PEQUENOS ÂNGULOS. Aguiaraldo M. Severino e Frank P. Missell (Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da USP-CP 20516)

Na caracterização magnética dos materiais amorfos, o estudo dos fenômenos magnetoelásticos e a determinação experimental da magnetostrição  $\lambda_s$ , são de fundamental importância.

Construímos um equipamento para determinar  $\lambda_s$ , onde é usada a técnica de rotação da magnetização por pequenos ângulos - SANMR. Este método de medida foi originalmente proposto por Marita et al., e é bastante sensível mesmo para os valores pequenos, além de ter-se a vantagem de poder ser utilizado independentemente do sinal de  $\lambda_s$ .

Fizemos algumas modificações na teoria desta técnica de medida, de maneira a incluir-se a presença das tensões internas nas fitas devido ao processo de fabricação. Através destas modificações, os efeitos de relaxação das tensões internas por tratamento térmico podem ser acompanhados.

Os resultados experimentais obtidos para tratamentos térmicos na liga de composição  $Fe_{1-x}Si_xC_2$  são muito bem reproduzidos por simulações usando as equações da nova teoria. Para o caso de amostras baseadas em Co, com  $\lambda_s$  negativa e pequena, os efeitos de relaxação não podem ser examinados, pois no limite de  $\lambda_s$  pequena as correções introduzidas são desprezíveis. (CNPq, FAPESP e FINEP).

**AMO/8:20/5A.F**

#### AFTEREFFECT da PERMEABILIDADE MAGNÉTICA em LIGAS de FERRO-COBALTO\*

Abbasir T. Rozende e Reiko S. Turtelli - IFGW - UNICAMP

O aftereffect magnético de dois grandes grupos de ligas amorfas é bem conhecido: o das ligas ricas em Cobalto e o das ligas ricas em Ferro, ambos apresentando um comportamento quadrático em relação à magnetostrição. No sentido de compreender a transição entre estes dois grupos foram preparadas amostras com composição na forma  $(Co_xFe_{1-x}Si_5B_{10}-O_4)_{x/50}$  e efetuadas medidas de aftereffect e magnetostrição da saturação à temperatura ambiente, e do Nitrogênio líquido.

(+) Financiada pela FAPESP

**AMO/8:40/5A.F**

#### EFEITOS DAS CONDIÇÕES DE FABRICAÇÃO DAS FITAS FERROMAGNÉTICAS NO AFTER EFFECT DA PERMEABILIDADE MAGNÉTICA

Homotaro Imaizumi e Reiko Sato Turtelli - DFESCM - IPGW - UNICAMP

Foram feitas medidas do after-effect da permeabilidade magnética com várias fitas amorfas de  $Fe_{40}Ni_{40}B_{14}$ , produzida com velocidades de resfriamento diferentes, no intervalo compreendido entre temperatura ambiente e a temperatura de Curie do material. Os resultados mostram que as intensidades máximas do after-effect, as posições destas e o valor da temperatura de Curie estão relacionadas às condições de fabricação dessas fitas.

**AMO/9:00/5A.F** **ORDEM DE CURTO ALCANCE NO SISTEMA AMORFO Mn<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub>. Valderes Drago**  
(Dept. Física, Universidade Federal de Santa Catarina) e **Elisa B. Saitovitch** (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas).

Apresentamos um estudo sistemático e *in situ* por Espectroscopia Mössbauer <sup>119</sup>Sn do sistema amorfó  $Mn_xSn_{1-x}$  ( $0.09 \leq x \leq 0.95$ ) obtido pelo congelamento do vapor.

A comparação dos valores do deslocamento isomérico e do deadobramento quadrupolar em diferentes concentrações com os valores das correspondentes fases intermetálicas, sugere a existência de uma ordem de curto alcance semelhante àquela que se estabelece nas correspondentes fases cristalinas.

**AMO/9:20/5A.F** **DENSIDADES DE ESTADOS EM  $\alpha$  - Zr Co**  
**Sandra Ferreira, Jayme Duarte Jr. e Sonia Frota-Pessôa** (Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

Nos últimos anos desenvolveu-se um esquema simples baseado no método de *re*corrência aliado a uma Hamiltoniana LCAO parametrizada, para estudar estrutura eletrônica em metais de transição.

Esse esquema foi usado, aliado à uma parametrização bastante simples onde a hibridização  $sd$  é desprezada, para obter densidade de estados  $d$  em ligas amorfas de  $\alpha$  - ZrNi,  $\alpha$  - ZrCu e  $\alpha$  - ZrFe. Neste trabalho completámos a série calculando a densidade de estados para  $\alpha$  - ZrCo e comparámos nossos cálculos com resultados experimentais existentes. Recentemente foi desenvolvida uma parametrização mais quantitativa baseada na LMTO. Apresentaremos resultados para  $\alpha$  - ZrCo com a nova parametrização, a fim de comparar com os resultados anteriores.

**AMO/9:40/5A.F** **RESISTIVIDADE ELÉTRICA DA LIGA AMORFA Fe<sub>0.92</sub>-Zr<sub>0.08</sub>** **P.Purleur, W.R.Schreil**  
**Bar e J.V.Kunzler - Instituto de Física - UFSC** **D.H.Ryan e J.M.D.Coye - University of Dublin, Trinity College**

Medidas de resistividade elétrica utilizando uma técnica AC de alta precisão são efetuadas numa liga amorfá de  $Fe_{0.92} - Zr_{0.08}$  entre 2.5 K e 300 K. Os resultados revelam peculiaridades relacionadas ao estado magnético da amostra. As ligas amorfas Fe-Zr, em altas concentrações de Fe, mostram as características interessantes dos sistemas magnéticos reentrantes. Em particular, a presente amostra sofre uma transição de fase paramagnética-ferromagnética em 180 K, ao passo que em temperaturas inferiores a 100 K ela passa a apresentar propriedades magnéticas irreversíveis próprias de um estado do tipo vidro-de-espia.

Uma análise detalhada da resistividade e de sua derivada próximo a T, permite a determinação do expoente crítico  $\alpha$ . O valor determinado neste sistema difere significativamente dos valores normalmente encontrados nos sistemas ferromagnéticos colineares, sendo no entanto coerente com os expoentes característicos da susceptibilidade e da magnetização. Os resultados também sugerem que as flutuações magnéticas persistem e dominam a resistividade num grande intervalo de temperatura acima de T. Estas características podem ser indicativas de algumas diferenças essenciais entre a fase ferromagnética de um sistema reentrant e o ferromagnético colinear ordinário.

AMQ/10:15/54.F ESTADOS LOCALIZADOS NUMA REDE DE BETHE DESORDENADA. José Ernesto Ura (Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense).

Utilizando a representação da matriz de transferência em forma de fração contínua calculamos por simulação numérica o raio de convergência da mesma em função da desordem diagonal para um modelo tipo Anderson. Esse valor da energia que separa estados localizados de estados estendidos permite estabelecer um critério de borda de mobilidade que coincide parcialmente com modelos teóricos e com cálculos numéricos da condutividade. O método é estendido a outros tipos de redes.

AMQ/10:35/54.F NUCLEAÇÃO ADIABÁTICA APLICADA A POLÍMEROS E VIDROS. Máximo P. da Silveira e Erich Meyer - Instituto de Física - UFRJ.

O modelo de nucleação adiabática, recentemente desenvolvido por E.Meyer, está sendo usado para calcular os limites de estabilidade para a fase líquida super-resfriada de vários polímeros e vidros cerâmicos. Neste cálculo vem sendo usada uma aproximação mais realística para o calor específico das fases, ou seja, é introduzida a dependência com a temperatura através de um ajuste polinomial de segunda ordem. Resultados preliminares para os polímeros vêm demonstrando a consistência do modelo, cujas previsões para o caso dos vidros cerâmicos serão discutidas.

AMQ/10:35/54.F TRANSIENTE DE CORRENTE ELÉTRICA EM AMOSTRAS DE PVDF DEVIDO A ÁGUA DE VOLUME. Neri Alves - Depto.Ciências Ambientais-IPEAPP/UNESP-Pr. Prudente; Roberto Mendonça Faria - Depto. de Física e Ciência dos Materiais-IFQSC-UFRJ,São Carlos-SP.

Uma condutividade evanescente, dependente do tempo, tem sido detectado nos filmes de PVDF da Bemberg Folien. Após muitos ciclos de polarização e despolarização, a corrente de absorção torna-se fortemente reduzida, para o mesmo nível das correntes de despolarização. Esta condutividade é facilmente observada, aparecendo na corrente de polarização pela aplicação de altos campos. É observado - recuperação em amostras deixadas em atmosfera úmida. Nós interpretamos estas observações como sendo uma limpeza, pelo caminho elétrico, dos íons gerados por uma acentuação da dissociação de moléculas de água absorvida no volume, pela ação desse campo.

**AMD/11:13/SA.F** MEDIDAS ISOTÉRMICAS EM FILMES DE PVDF  
Autores Alfredo Jorge e Roberto Mendonça Faria (UFMT-Cbf-MT e IFQSC-USP-São Carlos)  
Este trabalho consistiu basicamente no estudo das propriedades elétricas de filmes de PVDF fase Alfa fabricado pela Bemberg Fólien Co.

Dentre as técnicas utilizadas neste trabalho, destacamos aqui as medidas isotérmicas com inversões de campo elétrico, onde nos foi possível detectar a influência da umidade na condução superficial dos filmes de PVDF na sua fase Alfa. Aplicamos numa amostra com eletrôdos em ambos os lados, sem anel de guarda, um campo elétrico de 200 KV/cm e quando sua corrente de carga ou absorção dielétrica se tornou quase estacionária, fizemos a inversão do mesmo e observamos então a presença de um pico de corrente, que se repetiu após cada inversão. Para este caso, utilizamos temperatura e umidade ambiente. Em ambientes seco(sílica-gel), vácuo, temperatura de 139°C ou à temperatura ambiente e umidade ambiente porém com anel de guarda na amostra, os picos de corrente não foram mais observados. Medidas auxiliares foram realizadas com o objetivo de verificar injeção de carga no interior da amostra pelos eletrôdos. Os resultados mostraram um comportamento próximo do ohmico nas curvas I versus V, indicando a não injeção.

**AMD/11:35/SA.F** ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA EM IONS METÁLICOS DOPADOS EM VIDRO.  
Gilsen A.R.Lima, N.Vargas, H.L.Bresser, E.C.da Silva (Instituto de Física-UNICAMP)

A possibilidade de uso da técnica de separação dos espectros na fase, a uma frequência fixa, é proposto como método de resolução do espectro de cada componente em uma matriz composta. Usando amostra soda-línea sílica (vidro) dopada com misturas de CuO-CrO<sub>3</sub> e CuO-CrO<sub>3</sub> os espectros registrados estão de acordo com aqueles obtidos quando um único óxido é posto na matriz. Também uma estimativa do tempo de relaxação térmico não radiativo pode ser obtido para cada componente.

AMO/10:15/6A.F

DIAGRAMA DE FASES MAGNÉTICAS NO SISTEMA AMORFO  $S_{n100-x}Mn_x$ .

Drago V., e E. Baggio Saitovitch (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas da Universidade Federal de Santa Catarina).

O sistema amorfio  $SnMn$  foi produzido sob a forma de filmes finos, por congelamento de vapor em um substrato de quartzo a 20K, na faixa de concentração de 9 a 95% at. de manganes. Com base em medidas *in situ*, feitas por Espectroscopia Mossbauer / (EM)  $^{119}Sn$  e resistividade elétrica d.c., os resultados de referência 1 foi possível propor o diagrama de fases magnéticas em função de concentração dos Mn. Este diagrama envolve uma fase vídro de Spin ( $x < 60$ ), uma fase mista ( $60 < x < 85$ ) e uma fase aniferromagnética ( $x < 85$ ). A temperatura de ordem magnética ( $T_f$ ) foi medida por EM, método da varredura térmica em velocidade constante, em todo o intervalo de concentração, e também por susceptibilidade a.c. ( $\chi_{ac}$ ) para  $x$  até 60 (1). De inicio  $T_f$  cresce linearmente com  $x$  e tende a uma saturação, para começar a diminuir a partir de  $x = 70$ , podendo ser extrapolada para valores nulos em  $x = 100$ . A mesma tendência é apresentada pelos valores de campo médio de saturação transferido ao núcleo do  $^{119}Sn$ . A análise do EM em função da temperatura para  $x = 44$  e 68, revelam a presença de uma dupla transição magnética que pode estar associada a um fenômeno de reentrância magnética. (1) U. Henger and K. Korn: *Physica* 138B (1986) 23T.

AMO/10:35/6A.F

ESTUDO DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE METAIS DE TRANSIÇÃO VIA MÉTODO DE RECORRÊNCIA Jaime Duarte Júnior e Sonia Frota-Pessa (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Nosso objetivo é aplicar o método de recorrência e um critério de Stoner auto-consistente para avaliar momentos magnéticos em ligas envolvendo metais de transição. O procedimento desenvolvido com este fim não envolve nenhum parâmetro ajustável e, por ser feito no espaço direto, pode ser aplicado para avaliar a distribuição de momentos magnéticos em materiais amorfos.

Através de alguns exemplos investigaremos neste trabalho o efeito de hibridização s-d e do termo "on-site" sobre o momento magnético local. Pretendemos também apresentar os primeiros resultados para distribuição de momentos locais em sistemas não-periódicos, usando um modelo simples constituído por um pequeno "cluster" amorfo com 20-30 átomos de Fe, sujeito a condições periódicas de contorno.

AMO/10:55/6A.F

LIGAS AMORFAS DE ALTA PERMEABILIDADE

M.V.P.Altoé, M.S.Lancarotte, F.P.Missell - Instituto de Física da USP.

Ligas amorfas à base de cobalto são materiais extremamente versáteis, podem ser aplicados em blindagem magnética, cabega de gravação, transdutores e sensores.

A técnica conhecida por "Planar Flow Casting" tem sido utilizada na fabricação da liga VITROVAC 6025, de alta permeabilidade magnética e composição nominal  $Co_{66}Fe_4Mo_2Si_{16}B_{12}$ .

O desenvolvimento de cadinhos com orifícios retangulares, um novo sistema para posicionamento do cadinho e a utilização de uma roda de cobre-cromo 12, foram determinantes para se conseguir fitas uniformes com largura maior que 10mm. Valores de Ms, Tc,  $\lambda_s$ , Hc, umáx e unícial medidas para fitas de composição  $Co_{66}Fe_4Mo_2Si_{16}B_{12}$  mostraram-se ligeiramente afastados daqueles fornecidos pelo fabricante do produto comercial VITROVAC 6025.

Pequenas variações na composição química afetam significativamente as propriedades magnéticas sendo este o procedimento adotado para se alcançar as propriedades desejadas.

Trabalho patrocinado pela FINEP, CNPq e FAPESP.

AMO/11:15/6A.F EFEITOS DE RELAXAÇÃO ESTRUTURAL EM FERROMAGNETOS AMORFOS. Israel Alarcon, Marcelo S. Lancarotte, Antonio D. Santos e Frank P. Missell-(Deptº de Física dos Materiais e Mecânica do IFUSP - CP. 20.516).

Estamos realizando estudos do efeito de tratamentos térmicos sobre as propriedades magnéticas das ligas amorfas de composição  $\text{Co}_{33}\text{Fe}_{20}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ ,  $\text{Co}_{70.4}\text{Fe}_{4.6}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$  e  $\text{Co}_{75}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ .

Medidas de campo coercivo  $H_c$  e energia de anisotropia efetiva  $K_{eff}$  foram realizadas nestas amostras não tratadas e após tratamentos térmicos na ausência de campos magnéticos. As medidas foram feitas a temperatura ambiente, após o material ter sido tratado por 2 horas a temperaturas sucessivamente crescentes, desde  $100^\circ\text{C}$  até  $425^\circ\text{C}$ .

O efeito do tratamento térmico é bastante intenso, sendo que na fita de  $\text{Co}_{70.4}\text{Fe}_{4.6}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$  obtivemos, após o tratamento a  $250^\circ\text{C}$ ,  $H_c \approx 20$  vezes a  $K_{eff} \approx 10$  vezes superiores aos correspondentes valores para a amostra não tratada, enquanto que após o tratamento a  $325^\circ\text{C}$  esses valem a ser iguais aos obtidos para a amostra não tratada.

Estes resultados podem ser entendidos em termos de um modelo onde variações na anisotropia magnética resultam em contribuições ao campo coercivo  $H_c$ . Um tratamento térmico abaixo da temperatura de Curie resulta no ordenamento de pares de átomos magnéticos e a criação de uma anisotropia induzida, resultando num aumento em  $H_c$ . Acima de  $T_c$ , um tratamento térmico desordena os pares atómicos, eliminando estes efeitos. A cinética dos ordenamentos atómicos será estudada para fornecer tempos de relaxação característicos dos processos.  
Trabalho patrocinado pelo CNPq, FAPESP e FINEP.

AMO/11:35/6A.F SÍNTSE DE MATERIAIS MAGNÉTICOS À PARTIR DA TERMÓLISE DE HIDROXOS-SAIS DE FERRO (III) AMORFOS. Marco Iacovacci, Edson Corrêa da Silva, Helion Vargas, (Instituto de Física, Eduardo A. Pinheiro e Fernando Galembeck, Instituto de Química - UNICAMP.

Por termólise de hidroxossais de ferro é possível sintetizar magnetita e maghemita. Por medidas de Ressonância Magnética Eletrônica tem sido possível monitorar as transformações que ocorrem nesse processo e que envolvem crescimento, coalescência, cristalização e orientação magnética. Medidas de Raios X e Análise química permitem caracterizar os produtos finais. Medidas em Efeito Fototérmico permitem a obtenção de propriedades ópticas e térmicas dos materiais. Em particular procuramos estabelecer um modelo teórico ligando as larguras de linha da RME, a a intensidade do sinal fototérmico, com os tamanhos das partículas no processo. Com essas técnicas estamos estabelecendo uma sistemática na síntese dos materiais magnéticos envolvendo hidróxido, hidroxacetato, hidroxoclorato e hidroxofosfato de ferro III amorfos.

**FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR**  
**Coord.: - Sylvio Canuto (UFPE)**

**AID/8:00/4A,F** ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELETRONS POR ÁTOMOS DE MAGNÉSIO: ESTUDO DAS EXCITAÇÕES  $3^1P$  e  $3^3P$ . - Cesar José Bonjuani Pagan<sup>a</sup>, Gilda Dalcanale Meneses<sup>a</sup> e Luiz Eugênio Machado<sup>a,b</sup> (\* - UNICAMP, IFGW; \*\* - Universidade Federal de São Carlos)

A Teoria de Muitos Corpos em Primeira Ordem foi utilizada para calcular as Secções de Choque Diferencial (SCD) e Integral (SCI) para o impacto eletrônico com um alvo de Mg inicialmente no estado fundamental, para excitação dos estados  $3^1P$  e  $3^3P$ , para as energias do elétron incidente de 10, 20, 30, 40, 50 e 100 eV. Para a transição opticamente permitida, calculamos também os parâmetros da experiência de coincidência eletron-fóton  $\lambda$ ,  $x$  ou  $y$ ,  $\langle L \rangle$ .

Na Teoria Utilizada o potencial de transição é do tipo static-exchange, sem levar em conta qualquer efeito de correlação ou polarização. Os orbitais ligados do alvo foram obtidos na aproximação Hartree-Fock (HF) para o estado fundamental e para o estado excitado, HF de círculo congelado. Os orbitais do contínuo também foram calculados na aproximação HF.

Os resultados obtidos concordam de maneira geral muito bem com o experimento. Observamos que as SCD para a excitação do estado  $3^1P$  calculadas possuem pontos de máximo e mínimo que concordam muito bem com o experimento e para ângulos pequenos as curvas teóricas ficam completamente dentro do desvio experimental estimado conforme a energia cresce (apesar do efeito de polarização). Os parâmetros da experiência de coincidência também concordam com os dados experimentais. Obtivemos também uma boa concordância para a excitação do estado  $3^3P$ .

**AID/8:20/4A,F** ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS DE BAIXA ENERGIA POR MOLÉCULAS POLIATÔMICAS. Pedro F. Tavares<sup>a</sup>, Luiz E. Machado<sup>a,b</sup>, Marco A.P. Lima<sup>a</sup> e Luiz M. Brescansin<sup>a</sup> (\* Unicamp, Campinas, SP; \*\* UFSCar, São Carlos, SP; \*\*\* IEAv, São José dos Campos, SP)

Neste trabalho apresentamos os resultados parciais do espalhamento elástico de elétrons pela molécula  $H_2S$ , utilizando o Método de Schwinger Variacional<sup>1</sup>. Até recentemente vinha sendo aplicado apenas a moléculas lineares, mas foi estendido<sup>2</sup> para poder calcular secções de choque de elétrons por moléculas poliatômicas com simetrias  $C_{2v}$ ,  $D_{2h}$ , etc. Sempre que possível, comparamos nossos resultados com dados experimentais disponíveis.

1. R.R. Lucchese, D.K. Watson and V. McKoy, Phys. Rev. A22, 421 (1980).
2. Luiz E. Machado, Marco A.P. Lima and V. McKoy, em preparação.

**AID/8:40/4A,F** EFEITOS DO SPIN EM EXPERIÊNCIA DE COINCIDÊNCIA ELETRON-FÓTON. Fernando J. da Paixão, Instituto de Física - UNICAMP.

Apresentaremos a análise da Experiência de Coincidência Eletron-Fóton de uma maneira que resalta a influência do spin do elétrons. Como estas experiências são realizadas com feixe de elétrons não polarizados, ou seja o feixe de elétrons é incoerente no que diz respeito ao spin, este é o responsável pela coerência da experiência. Vamos mostrar em que condições existe a "transferência" da incoerência do feixe de elétrons para a experiência através da análise de três casos bem distintos, He, Kr e Na. Esta análise nos permite prever que informações adicionais poderemos obter se a experiência for realizada com elétrons polarizados<sup>1</sup>.

(1) J.J. McClelland, M.H. Kelly e R.J. Callota, Phys. Rev. Lett. 55, 688 (1985) e Phys. Rev. Lett. 56, 1362 (1986)

ATO/9:00/4A.F FOTOIONIZAÇÃO DE MOLÉCULAS POLIATÔMICAS. Eduardo Miranda<sup>1</sup>, Luis E. Machado<sup>2</sup>,  
Marco A.P. Lima<sup>3</sup> e Luis M. Brescansin<sup>4</sup> (\* Unicamp, Campinas, SP; <sup>2</sup> UFSCar, São Carlos, SP;  
<sup>3</sup> IEAv, São José dos Campos, SP).

Até recentemente, o Método de Schwinger Variacional<sup>1</sup> vinha sendo aplicado com sucesso para o estudo de secções de choque de fotoionização de moléculas lineares. Foi, entretanto estendido, para poder ser utilizado para o cálculo de fotoionização de moléculas poliatômicas<sup>2</sup> com simetrias  $C_{2v}$ ,  $D_{2h}$ , etc. Neste trabalho, apresentamos os resultados parciais de secções de choque de fotoionização de  $H_2S$ , para os canais  $A_1$ ,  $B_1$  e  $B_2$  e compararmos nossos resultados com outros disponíveis na literatura.

1. R.R. Lucchese and V. McKoy, Phys. Rev. A24, 770 (1981).
2. Luiz E. Machado, Marco A.P. Lima and V. McKoy, em preparação.

ATO/9:20/4A.F POLARIZAÇÃO DE SPIN NO ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR ATO MOS: O EFEITO SPIN-ÓRBITA NAS TRANSIÇÕES  $3^1S-3^3P_{0,1,2}$  DO ÁTOMO DE NEÔNIO. M.C.C. Ferraz (IFUSC/UPSC), L.E. Machado, E.P. Leal (DF/UFSCar) e G.D. Meneses (IFGW/ UNICAMP).

Foi mostrado por Hanne [Phys. Rep. 95, 95(1983)] que a excitação de átomos por impacto eletrônico pode levar a efeitos de polarização de spin quando o estado excitado quebra a regra do acoplamento LS (é o efeito spin-órbita, cf. Hanne). Este é o caso das excitações  $2p-2p3s$  do Ne, cujos estados seguem o mesmo esquema de acoplamento intermediário [Cowan and Andrew, J.Opt.Soc.Am.55, 502(1965)]. Para estas transições e com um feixe incidente não polarizado, podemos calcular uma função de polarização de spin

$$S_p(\vec{K}, \vec{K}') = \frac{N_{\downarrow} - N_{\uparrow}}{N_{\downarrow} + N_{\uparrow}}$$

onde  $N_{\downarrow}$  ( $N_{\uparrow}$ ) é o número de elétrons com spin paralelo (antiparalelo) à normal ao plano de espalhamento.  $N_{\downarrow}$  e  $N_{\uparrow}$  são funções dos momentos  $K$  e  $K'$  dos elétrons incidente e espalhado, respectivamente.

Estamos utilizando a Teoria de Muitos Corpos em Primeira Ordem (FOMBT), proposto por Csanak et Al [Phys. Rev. A3, 1322(1971)] para calcular a função  $S_p(\vec{K}, \vec{K}')$  das transições  $3^1S-3^3P_{0,1,2}$  do Ne, para energias do elétron incidente entre 20 e 100 eV. Embora não haja valores experimentais disponíveis, existem cálculos semelhantes para átomos de He [Csanak and Cartwright, submetido J.Phys.B(1986)], Hg [Bartschat and Madison, submetido J.Phys.B(1986)] e Mg [Meneses et al, submetido J.Phys.B (1987)].

ATO/9:40/4A.F SIMULAÇÃO DE NÚMEROS GRANDES E PEQUENOS NOS PROGRAMAS DE COMPUTADOR  
Cesar José Bonjani Pagan IFGW - Universidade Estadual de Campinas

Subrotinas que simulam números grandes ou pequenos foram construídas para evitar problemas em sistemas onde os limites numéricos não satisfazem as necessidades do cálculo científico.

Os números reais são substituídos por pares de números de maneira que os novos limites numéricos passam a ser de  $10^n$ ,  $10^{-n}$  onde  $n$  é o maior inteiro permitido mais um. As subrotinas de simulação fazem as operações de soma e subtração (SUMA), multiplicação (MULTIP) e divisão (DIVI), e exponenciação (EXPX). São substituídas na parte do programa de computador onde ocorrem problemas retornando facilmente à programação usual em seguida.

Estas subrotinas foram utilizadas com sucesso pelo Grupo de Física Atômica e Molecular do IFGW da UNICAMP, para calcular os orbitais de espalhamento do alvo de Mg, e no cálculo das integrais de dois elétrons de Slater para obtenção das Secções de Choque Diferenciais do Mg, podendo ser usadas para resolver qualquer outro problema de números grandes ou pequenos, impossíveis de ser simbolizados pelo computador utilizado.

ATO/10:15/4A.F

## ESTUDO DE SISTEMAS INTEGRÁVEIS BIDIMENSIONAIS COM INVARIANTES QUÂNTICOS

Marcus Werner Beims e Jason Alfredo Carlson Gallas,  
Departamento de Física da UFSC, 88049 Florianópolis.

Estudamos sistemas dinâmicos bidimensionais hamiltonianos cuja forma geral para um invariante de ordem n nos momentos

$$I(p_x, p_y, x, y) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0, i+j \leq n}^{n-i} a_{ij}(x, y) p_x^i p_y^j$$

obtemos um conjunto de 21 equações diferenciais parciais para os  $a_{ij}$ , que expressa a condição necessária e suficiente para  $I(p_x, p_y, x, y)$  ser invariante. Para sistemas hamiltonianos  $H(p_x, p_y, x, y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y)$ , o conjunto de equações diferenciais parciais é formado de dois subconjuntos de equações, um (10 equações) envolvendo os  $a_{ij}$  e o potencial e o outro (11 equações) envolvendo somente os  $a_{ij}$ . Apresentamos soluções gerais para este último conjunto bem como resultados específicos para o hamiltoniano de Hénon-Heiles,  $V(x, y) = \frac{1}{2}(Ax^2 + By^2) + Cx^2y - \frac{1}{3}By^3$ .

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

ATO/10:35/4A.F

## VALIDADE ENTRE SISTEMAS QUÂNTICOS

Fernando Cabral e Jason Alfredo Carlson Gallas,  
Departamento de Física da UFSC, 88049 Florianópolis.

Neste trabalho mostramos que a já conhecida transformação dual que conecta sistemas hamiltonianos integráveis clássicos em duas dimensões pode ser estabelecida em N dimensões a partir de uma formulação quântica do problema.

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

ATO/10:55/4A.F

## QUANTIZAÇÃO DE DYRONIUM PELO MÉTODO DA INTEGRAL DE TRAJETÓRIA.

BIN KANG CHENG (Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná)

Usando a transformação de Kustaanheimo-Stiefel e a substituição do tempo novo, obtemos exatamente a função de Green de dyronium com Lagrangeana

$$L(\vec{r}, \vec{\dot{r}}) = \frac{m}{2} \vec{\dot{r}}^2 + q \vec{\dot{r}} \cdot \vec{B}(\vec{r}) + \frac{q}{r} \left\{ \vec{B}(\vec{r}) \cdot (\vec{x} \vec{i} - \vec{y} \vec{j}) \left[ \pm 1 - (z/r) \right] / (r^2 - z^2) \right\}$$

onde:  $q = e_1 \beta_2 - e_2 \beta_1$ ,  $\vec{B}(\vec{r}) = -(e_1 \vec{e}_2 + e_2 \vec{e}_1)$  e  $e_i$  e  $\beta_i$  são respectivamente, as cargas elétricas e magnéticas da partícula  $i$ . Em seguida, calculamos autofunções e os autovalores da energia, expandindo a função de Green obtida.

ATO/11:15/4A.F

"ESTADOS ESTACIONÁRIOS DE DUAS PARTÍCULAS DE DIRAC EM UM CENTRO COULOMBIANO"-José Futoshi Yamamoto e Augusto Agostinho Neto - Instituto de Física USP  
A proposta do trabalho é investigar os níveis de energia de um étemo de duas partículas (em particular, He e He-múonico) através de uma hamiltoniana fenomenológica.

Pratendemos obter uma equação algébrica de autovalores por intermédio desta hamiltoniana efetiva e da expansão da função de onda em produtos simetrizados diretos de um conjunto completo de funções de uma partícula. O objetivo é descrever efeitos de correlação e efeitos relativísticos. Eventualmente, as chamadas correrções radiativas podem ser analisadas.

ATO/11:35/4A.F

ALIGNEMENT IN RESONANT PHOTOIONIZATION OF HELIUM ATOMS - José Eduardo Martinho Hornos - IFQSC/USP

The bombardement of atomic Helium by vacuum-uv photons causes the resonant ionization of the system and consequently the alignement of the Helium ions produced in the reaction. The Schrodinger equation for the three body system in the continuum is solved based. In the use of hyperspherical coordinates for the six-dimensional Hamiltonian. First potential curves and enalytical channel functions on the variables  $\theta, \phi, \varphi_1, \varphi_2, r = \tanh^{-1} r_1/r_2$  are obtained. Finally radial equations on the variable  $R^2/r_1+r_2$  are numerically solved. precise wave functions are obtained and the alignement tensor is sucessfully calculated. Comparation with experiments are now possible and in progress.

ATO/11:55/4A.F

OPTIMIZATION BY ANNEALING IN ATOMIC PHYSICS: AN UNIFIED DESCRIPTION OF LIGHT ATOMS BELOW THE MULTIPLE IONIZATION THRESHOLD - José Eduardo Martinho Hornos - IFQSC/USP

Spherical coordinates in 3N dimentions provides the natural frame work for the analysis of the N body Coulomb system. It also allow one to naturally decouple the problem in two steps, first potential curves are obtained and then radial equations solved. This technique has been implemented for two-electron atoms and few-body nuclear systems. In atomic systems the implementation for larger systems is obstructed by the need of large diagonalizations or optimization of multi-variables functions. The advantage of the hyperspherical coordinates formalism is it's unified description of the all atomic properties bellow the multiple ionization threshold. Recently a method which allow one to perform complex optimization procedures has been developed by Kirkpatrick et al, using statistical mechanics ideas and the idea of "annealing" local minimum traps can be avoided. We show how the simulated annealing idea and the hyperspherical formalism can be combined in order to calculate potential curves for complex systems.

**AIO/8:00/5A.F** POLIMORFISMO DO SULFETO DE ORTO-NITRO-DIFENILA. PREPARAÇÃO E PROPRIEDADES FÍSICAS DA FORMA META-ESTÁVEL. *Kumiko Koibuchi Sakane e Darwin Bassi* (Departamento de Física do Instituto Tecnológico de Aeronáutica - São José dos Campos).

A presente comunicação é parte de um trabalho mais amplo que visa estabelecer a natureza conformacional ou agregacional de formas polimórficas de moléculas orgânicas, pelos espectros infravermelhos e Raman. O sulfeto de orto-nitro-difenila apresenta duas formas com pontos de fusão 81,5°C ( $\alpha$ : estável) e 73,5°C ( $\beta$ : meta-estável). A literatura não menciona métodos de obtenção da forma  $\beta$  pura, indicando apenas o modo de obtê-la em mistura com a forma  $\alpha$ , o que é detectado pela investigação do ponto de fusão. Neste trabalho, a primeira amostra da forma  $\beta$  pura foi obtida por indução do selênio de orto-nitro-difenila, tendo-se aquecido o sulfeto até 220°C e juntado pequenos cristais de selênio ao sulfeto nessa temperatura de 60°C. O processo foi executado em lâmina de vidro no microscópio de Kofler para medida do ponto de fusão. A parte afetada pelo selênio foi retirada, verificando-se que o restante era a forma  $\beta$  do sulfeto de orto-nitro-difenila. Essa primeira amostra funcionou como semente para futuras induções. Essa operação permite obter apenas algumas centenas de milígramos de cada vez, portanto é descrito um processo em que quantidades de ordem de gramas podem ser obtidas. Reiteradas experiências permitiram estabelecer as condições em que a forma  $\beta$  pode transformar-se na  $\alpha$  pura. A conclusão é que o número de centros de cristalização desce fortemente com a temperatura desaparecendo quase por completo acima de 150°C. Até cerca de 180°C as moléculas  $\alpha$  e  $\beta$  ainda conservam sua identidade, que desaparece ao redor de 220°C. A interpretação desses resultados permite sugerir que o polimorfismo do sulfeto de orto-nitro-difenila é mais conformacional do que agregacional. Futuras interpretações de espectros infravermelho e Raman poderão trazer melhores informações sobre o assunto. (FAPESP - FINEP).

A10/B:20/5A.F

FATORES QUE INFLUENCIAM O CRESCIMENTO DO SEGUNDO COMPONENTE DE STOKES EM UMA CÉLULA RAMAN, Marcos Tadeu T. Pacheco (Instituto de Estudos Avançados, CTA, São José dos Campos, SP).

Um dos principais fatores que limitam a eficiência da conversão da energia do feixe de bombeamento, para o componente do primeiro deslocamento de Stokes (S1), é o aparecimento de radiação do segundo deslocamento de Stokes (S2) dentro do meio de interação. Considerando-se apenas no processo ERE, a radiação em S2 não iria interferir na conversão de energia da bomba para S1, desde que o ganho Raman para geração de S2 é pequeno, quando comparado ao ganho Raman para S1. Entretanto, os processos paramétricos fornecem um caminho pelo qual a radiação em S2 pode crescer e começar um processo de competição com S1. Na maioria dos casos experimentais, foi observado que o aparecimento de S2, com níveis de energia comparáveis ao de S1, ocorre para valores de potências de bombeamento bem próximos do limiar de geração Raman de S1. A explicação mais divulgada para este fato se baseia no efeito de retenção de fase, que ocorre no processo paramétrico que gera S2 utilizando energia de S1 e S0 (feixe de bombeamento). Neste trabalho é mostrado que esta explicação é conflitante com os fatos experimentais, desde que ela presume uma alta eficiência para a conversão S0 → S1. Uma nova explicação é proposta baseada apenas no processo paramétrico, sem levar em consideração a retenção de fase e um posterior efeito ERE envolvendo S1 e S2.

810/8·AD/SA E

**CERAÇÃO DE RADIAÇÃO EM 1,5m COM ALTA EFICIÊNCIA DE CONVERSÃO,** Marcos Tadeu T. Pacheco (Instituto de Estudos Avançados, CTA, São José dos Campos, SP).

A utilização do espalhamento Raman estimulado (EKE) para geração de radiação no infravermelho próximo com níveis significativos de potência tem se mostrado uma técnica bastante prática e conveniente. Neste trabalho, é apresentada uma maneira simples de se obter radiação na região do espectro, em torno de 1,5μm, utilizando EKE. O arranjo experimental inclui duas células Raman contendo metano e bombeadas simultaneamente por um laser de Nd:YAG Q-switched. A primeira age como um oscilador Raman gerando uma radiação semente que é amplificada na segunda célula. O metano foi escolhido como meio Raman devido ao seu deslocamento Raman vibracional, que permite obter radiação em 1,5μm com apenas um deslocamento Raman da radiação de bombeamento. Uma vantagem adicional, apresentada por este gás, é a absorção da radiação em comprimentos de onda na região acima de 2,0μm. Isto é fundamental neste experimento, desde que elimina a competição entre o S1 e S2 (primeiro e segundo deslocamentos de Stokes), possibilitando o S1 atingir altos níveis de potência. A configuração utilizada, oscilador/amplificador, elimina, também, a possibilidade do componente S1 perder energia via interação paramétrica para altas ordens de Stokes, devido ao controle da geometria do feixe e da pressão do gás nas duas células.

**ATO/9:00/5A.F** **ESPECTROSCOPIA RAMAN RESSONANTE** **Silvio Luiz Souza Cunha** (Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre)

Discutiremos a aplicação da técnica de espectroscopia Raman Ressonante no estudo de estados moleculares repulsivos. O método consiste em medir o espetro Raman envolvendo uma ressonância entre um estado molecular ligado e um estado dissociativo usando laser sintonizáveis. A variação do espetro obtido com o comprimento de onda nos traz informação sobre a curva de energia potencial do estado repulsivo superior. Essa técnica baseia-se na formulação dependente do tempo para o espalhamento Raman desenvolvida por E. J. Heller et al. (J. Chem. Phys. 68(5):2066 (1978); J. Chem. Phys. 71(12):4777 (1979); J. Phys. Chem. 86:1822 (1982)). Em nosso laboratório aplicamos esta técnica no estudo de estados repulsivos de moléculas diatônicas ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{I}_2$ ) e poliatônicas ( $\text{O}_3$ ,  $\text{CBr}_2\text{I}$ ,  $\text{CF}_3\text{NO}$ ) usando um laser de corante contínuo bombeado por um laser de Argônio.

**ATO/9:20/5A.F** **ESTUDO DE DENSIDADES SUPERFICIAIS DE CARGAS ATRAVÉS DE CÁLCULO AUTO CONSISTENTE.** **Márcia da Costa Pereira** (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP) e **Gilmar Eugenio Marques** (Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos).

A formação de cargas elétricas em camadas de inversão em semicondutores e em superfícies de Hélio Líquido está bem estabelecida tanto teórica quanto experimentalmente. Para semicondutores o desenvolvimento de cálculos autoconsistentes permitiu uma quase completa caracterização das propriedades destas camadas de cargas em superfícies de Hélio, pois no regime de baixas densidades estas camadas podem ser estudadas como o problema de um elétron. Para altas densidades superficiais, no entanto, os efeitos de muitos corpos tornam-se relevantes, requerendo portanto um tratamento autoconsistente. Neste trabalho, desenvolvemos este tipo de cálculo para o tratamento dessas densidades superficiais de carga em Hélio, bem como em sólidos isolantes (Ne, Safira, H) e filmes de Hélio sobre algum substrato. Calculamos as energias de Transição de Estado Fundamental para os 19 e 20 excitados e a distância média de um elétron à superfície do material (em função da densidade) e obtivemos que o termo de muitos corpos não pode ser desprezado, no caso de filmes de Hélio, para densidades maiores que  $10^9 \text{ e}^-/\text{cm}^2$  e para o "bulk",  $10^8 \text{ e}^-/\text{cm}^2$ .

**ATO/9:40/5A.F** **UM ESTUDO SOBRE MÚLTIPLAS SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE HARTREE-FOCK-ROOTHAN PARA OS SISTEMAS DE CAMADA ABERTA**

**R.M. TEIXEIRA FILHO, L.A.C. MALBOUSSON**

**INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA**

As equações de Hartree-Fock-Roothaan (HFR) são usualmente resolvidas por um procedimento iterativo dotado de uma regra de ordenamento. Recentemente desenvolvemos um método alternativo de resolução da Equação HFR para sistemas de camada fechada no qual esta equação é transformada em um sistema de Equações Algébricas não-lineares. Pode-se assim determinar as múltiplas soluções da Equação HFR por este procedimento. O método foi aplicado com sucesso a alguns sistemas diatônicos.

No presente trabalho generaliza-se este procedimento para os sistemas de camada aberta, como introduzidos por Pople-Nesbet. São obtidos dois conjuntos de equações algébricas não-lineares correspondentes às duas equações de autovalor acopladas do método HFR-Pople-Nesbet.

**ATO/10:15/5A.F** REAÇÃO DE SUPRESSÃO DE LUMINESCÊNCIA DO ESTADO EXCITADO DO ION UO<sub>2</sub><sup>++</sup> POR ANIONES MONOVALENTES. G.A.Santarane (IPEA-UNESP-Presidente Prudente) R. L. Zimmerman (F.F.C.L. USP-Ribeirão Preto).

Estudou-se a reação do ion Urânio UO<sub>2</sub><sup>++</sup> no estado excitado com os íons inorgânicos monovalentes Nitrato NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e Iodato IO<sub>3</sub><sup>-</sup>, em solução aquosa à temperatura ambiente, utilizando-se das técnicas de fluorescência em regime de estado estacionário fotólise relâmpago e fluorescência resolvida no tempo. Com o aumento da concentração de tais íons numa solução contendo Urânio observou-se uma diminuição na intensidade da fluorescência e no tempo de vida para os sistemas Urânio-Nitrato e Urânio-Iodato, assim como o aparecimento dos radicais NO<sub>3</sub><sup>•</sup> e IO<sub>3</sub><sup>•</sup> respectivamente. Identificados por seus transientes espectros de absorção óptica. Tais resultados sugerem que a supressão de fluorescência do íon Urânio por ambos os íons é devida à uma reação de transferência de elétrons. Discute-se neste trabalho, o mecanismo proposto para a determinação da constante de velocidade de supressão de fluorescência para ambos sistemas.

(Patrocínio CNEN - Comissão Nacional de Energia Nuclear)

**ATO/10:35/5A.F** INIBIÇÃO DA FORMAÇÃO DE AGLOMERADOS DE SF<sub>6</sub> EM EXPANSÃO SUPERSONICA. Vladimír J. Trava Airoldi, Evaldo J. Corat, Maria Esther Sampaio e Alberto M. dos Santos (Instituto de Estudos Avançados - Centro Técnico Aeroespacial - CTA - São José dos Campos, SP) e Cesar C. Ghizoni (Instituto de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, SP).

Neste trabalho é apresentado um novo método para medir a formação de aglomerados ou a inibição de sua formação, em uma expansão supersônica livre e pulsada de moléculas de SF<sub>6</sub>, quando radiação intensa de um laser pulsado TEA de CO<sub>2</sub> é absorvida pelas moléculas. O princípio deste método é medir a distribuição de energia do feixe molecular depois de passar por um colimador, com e sem radiação incidente. A segunda expansão, devido ao colimador estar posicionado na região de colisões, é observada, e essa expansão é maior quando a radiação está presente. Com a radiação incidindo, a densidade de moléculas excitadas é maior nas bordas do feixe molecular. Este efeito pode ser usado como um novo método para separação isotópica.

**ATO/10:55/5A.F** SOBRE AS MÚLTIPLAS SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO HARTREE-FOCK PARA SISTEMAS DE CAMADA COMPLETA (L.A.C. Malbouisson Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia - 40000 Salvador - BA e J.D.M. Viana - Departamento de Física - Universidade de Brasília - 70910 - Brasília - DF)

Apresenta-se condições de estabilidade para soluções Hartree-Fock (HF) considerando-se diretamente o método LCAO-MO-SCF. Pelo método desenvolvido as condições de estabilidade são obtidas usando-se a teoria matemática de função a várias variáveis sujeita a condições subsidiárias. Como uma das consequências do método torna-se transparente a importância dos orbitais virtuais na análise das instabilidades HF. Os resultados obtidos são comparados a resultados de Cizek e Paldus para o caso de camada completa.

**ATO/11:15/5A.F** CÁLCULO AB INITIO DE SÓLITOS EM FRAGMENTOS DE POLIACETILENO. Luiz Carlos Comide de Freitas (Universidade Federal de Pernambuco, Departamento de Física) e Maria Cristina dos Santos (Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro).

Defeitos estruturais do tipo sóliton em cadeias de poliacetileno têm sido apontados como os responsáveis pelo aumento drástico na condutividade elétrica desse material quando submetido a dopagem química. Diversos modelos teóricos prevêm a existência de estados localizados em energia no meio do "gap" entre a banda de valência (completamente preenchida) e a banda de condução (vazia) associados aos defeitos. Embora sejam detectados experimentalmente os átomos eletrônicos correspondentes à ocupação parcial do nível do defeito - sóliton neutro - nenhum sinal de absorção ótica na região das energias correspondente ao "gap" é encontrado no polímero puro. Em regime de baixa dopagem o material passa a apresentar a atividade ótica esperada, indicando que a posição do nível do defeito em relação às bandas é bastante dependente da sua população eletrônica. Este trabalho tem por objetivo o estudo da estrutura eletrônica de fragmentos de poliacetileno com e sem defeitos tipo sóliton e a sua interação com dopantes típicos, como por exemplo os metais alcalinos. Pretende-se investigar a dependência da posição do nível do defeito em relação ao tamanho do fragmento, à sua população eletrônica e ao tratamento mecânico-quântico utilizado. Serão comparados os resultados obtidos através de cálculos Hartree-Fock com os obtidos de cálculos com interação de configurações de onde estudaremos o papel da correlação eletrônica sobre as propriedades do sóliton.

Apoio FINEP-CNPq.

**ATO/11:35/5A.F** ESTRUTURA GEOMÉTRICA E ELETRÔNICA DE SILA-E DISILA-CICLOBUTA  
DIZONO, A. M. MARQUA, A. L. A. FONSECA e NESTOR CORREIA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA - UnB - 70910, BRASÍLIA-DF

Apresenta-se cálculos SCF ("Self-Consistent Field") para os estados singuleto (fundamental) e triploto (primeiro excitado) para ciclobutadieno com carbono substituído por silício em uma e duas posições. Estuda-se as geometrias de equilíbrio nos dois estados e sua consequência no espectro de excitação. Comparam-se resultados MNDO ("Modified Neglect of Differential Overlap") e ab-initio.

ATO/8:00/6A.F

## FUNÇÃO DE ONDA PARA A SÉRIE ISOELETRÔNICA DO HÉLIO

Márcia Tibúrcio Fontenelle e Jason Alfredo Carlson Callas,  
Departamento de Física da UFSC, 88049 Florianópolis.

Cálculos recentes da energia do estado fundamental do íon  $H^-$  sugerem que uma base proposta em 1944 por Chandrasekhar pode ser mais conveniente que a base tradicional de Hylleras. Prosseguindo com nosso trabalho anterior [J Phys B 19, L639(1986)], investigamos em detalhes a base de Chandrasekhar. Nossa motivação principal é determinar funções tentativas boas para tratar potenciais atômicos (não separáveis) que envolvam explicitamente os ângulos de Euler tais como, por exemplo, o efeito Zeeman quadrático em átomos com dois elétrons.

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

ATO/8:20/6A.F

## EFEITO DE UM CAMPO MAGNÉTICO INTENSO NA INTERAÇÃO ENTRE HIDROGÊNIO E ANTI-HIDROGÊNIO

Jason Alfredo Carlson Callas,  
Departamento de Física da UFSC, 88049 Florianópolis.

Apresentamos um modelo simples para simular a interação entre átomos de hidrogênio e anti-hidrogênio em presença de um campo magnético intenso. Além de ser de interesse para o entendimento das interações fundamentais entre sistemas de poucos corpos em campos externos intensos, o presente modelo permite estudar o efeito de correlações numa situação em que não existe simetria de troca.

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

ATO/8:40/6A.F

## EFEITO ZEEBAN QUADRÁTICO EM HIDROGÊNIO

Paulo Cesar Rech (Dept de Ciências Exatas da FEJ-UDESC, 89200 Joinville) e Jason Alfredo Carlson Callas (Dept de Física da UFSC, 88049 Florianópolis).

Dando continuidade aos nossos estudos do efeito Zeeman quadrático em hidrogênio para intensidades arbitrárias do campo [J Phys B 18, 2199(1985); 19, L215(1986)], apresentamos resultados obtidos com o ensaio

$$\psi = e^{-i(E_0 n + \mu f_0)/\hbar} \sum_{l=0}^n \sum_{j=0}^n d_{lj} e^{i\epsilon_j} (l,n)^L (l,n+j)$$

para  $n=6$ , i.e. com 17 parâmetros variacionais.

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

ATO/9:00/6A.F. LMR SIMPLIFICADO. C.A.Ferrari, L.P.Sosman (Instituto de Física da UNICAMP).

Trata-se de um sistema de detecção do efeito Zeeman em moléculas paramagnéticas pela técnica da ressonância magnética por laser, na região do EVL(rotação). A célula da amostra está localizada na cavidade ressonante do laser-IVL, desenhada de tal maneira que é possível aplicar campos magnéticos relativamente fortes ( da ordem de 10 KGauss ), gerados por um eletromagneto construído em nosso laboratório. Com este sistema pretendemos caracterizar misturas gaseosas, que seria de grande interesse no controle da poluição ambiental.

ATO/9:20/6A.F. REVISÃO NA IDENTIFICAÇÃO DAS TRANSIÇÕES ELETRÔNICAS DO LiAl<sub>3</sub>O<sub>8</sub>:Fe<sup>3+</sup> - Técrito Abrutto e Fernando de Souza Barros; Instituto de Física - UFRJ.

E apresentada uma revisão na identificação das transições eletrônicas do ion Fe<sup>3+</sup> como impureza no alumínio de lítio. Medidas de luminescência, excitação e absorção fotoacústica foram feitas em amostras policristalinas na fase ordenada deste composto. O melhor ajuste com os nossos dados, para esta impureza coordenada tetraédricamente, foram obtidos usando  $B=605\text{cm}^{-1}$ ,  $C=3046\text{cm}^{-1}$  e  $Dq=770\text{cm}^{-1}$ , sendo medido um deslocamento de Stokes de  $933\text{cm}^{-1}$ .

ATO/9:40/6A.F. ESTUDO DAS INTERAÇÕES HIPERFINAS NA ESPÉCIE FeNH<sub>3</sub>. Joyce Terra, Diana Gruenburger e D.E. Ellis (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas e Northwestern University).

Atomos de ferro, aprisionados em matrizes congeladas de amônia, reagem para formar a molécula de FeNH<sub>3</sub> , ao contrário do que acontece quando o gás é nitrogênio ou metano. O espectro Mössbauer apresenta duas linhas estreitas e de igual intensidade, sugerindo uma interação quadrupolar e um sítio de ferro bem definido. O deslocamento isométrico medido é diferente do Fe<sup>0</sup> isolado em matriz de gás inerte, bem como dos monômeros em matrizes de nitrogênio e metano. Um grande valor para o campo magnético hiperfino é obtido, quando se aplica um campo magnético externo (E. Saltovitch, H. Literst e J. Terra, a ser publicado). Utilizando o método DVM na aproximação de densidade local, calculamos a densidade eletrônica, a grandeza e o sinal do gradiente de campo elétrico e o campo hiperfino de contato, para várias distâncias Fe - N. Estes resultados foram comparados com os dados experimentais dos parâmetros hiperfinos, a fim de determinar a provável configuração eletrônica para a espécie FeNH<sub>3</sub> .

**BIOFÍSICA**

**Coor.: - Amando S. Ito (IFUSP)**

**BIO/8:00/4A.F** BIOFÍSICA DE MELANINAS - PERSPECTIVAS DE DESenvolvimento. Maria Regina D. Kawamura e Amancio S. Ito Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Os resultados obtidos no estudo de sistemas melanoprotéticos, através de várias técnicas experimentais diferentes e segundo uma abordagem biofísica-molecular, permitem avançar algumas hipóteses relativas ao papel funcional das melaninas. Em particular, a existência de mecanismos de transferência de energia intermoleculares pode estar correlacionada à sua ação protetora. A partir desses resultados emergem várias questões relevantes e problemas bem definidos que podem constituir-se em novos programas de pesquisa.

**BIO/8:20/4A.F**

**ESTUDO PRELIMINAR SÔBRE A TENDÊNCIA DE POLIMERIZAÇÃO DAS MELANINAS: ASPECTOS ELETRÔNICOS**

Douglas Soares Galvão (IFGW/UNICAMP)

Marília Junqueira Caldas (IF-USP)

Apesar da estrutura e composição das melaninas não estiver bem caracterizada, não há dúvidas de que as unidades moleculares envolvidas estão relacionadas à indoliquina. Neste trabalho, estudamos, com base no formalismo de Hückel, os aspectos eletrônicos da tendência de polimerização (monômero, dímero, trímero, ..., polímero infinito) de algumas moléculas relacionadas à indolquinina. A escolha do método, em primeiro lugar, dá continuidade ao trabalho de Pullman e Pullman, permitindo um estudo comparativo de todo o grupo, dentro de uma mesma parametrização. Em segundo lugar, a simplicidade desse método, associada aos bons resultados obtidos para moléculas conjugadas em geral, nos permite realizar um estudo inicial razoavelmente confiável pois é independente de uma parametrização geométrica e a geométrica, mesmo dos monômeros mais simples, não está bem caracterizada. Este estudo é importante por duas razões: primeiro é importante conhecer até que ponto as informações obtidas a partir de uma molécula pequena (por exemplo, um dímero) são relevantes para o polímero. Por exemplo, os resultados que nós obtivemos dos cálculos de estrutura de bandas e densidades de estados (os primeiros realizados para estes materialinol) não confirmam as previsões fúteis a partir da extrapolação de cálculos moleculares por Pullman (1960). Em segundo lugar nos permite determinar quando a célula unitária é bem simulada por uma cadeia finita.

**BIO/8:40/4A.F** ESTUDO DE EFEITOS NÃO-TÉRMICOS DA RADIAÇÃO LASER EM TECIDOS VIVOS.

Mônica Alonso Cotte e Jorge Humberto Nicolo - IFGW/UNICAMP

Nossa objetivo neste trabalho é o de dar idéias claras sobre vários fenômenos biológicos funcionais relacionados à irradiação de tecidos vivos com lasers de baixa potência - os efeitos não-térmicos. Devido à diversidade de comprimentos de onda e densidades de energia com as quais foram observados anteriormente efeitos desse tipo, lançamos a hipótese de que a coerência da radiação utilizada fosse importante no processo. Para testar a validade dessa hipótese, construímos um dispositivo experimental permitindo a irradiação de larvas criadas artificialmente no dorso de ratos por um laser de He-Ne, ou - colocando-se um difusor em movimento à frente do feixe laser, por radiação desse mesmo laser com seu grau de coerência diminuído. Pela observação da cicatrização das lesões, mostramos que a coerência fator relevante no processo considerado. De ponto de vista teórico, realizamos um estudo sobre a distribuição do campo elétrico e intensidade sobre uma superfície dotada de micro-rugosidades quando irradiada por luz coerente. Em nossa opinião, uma distribuição desse tipo pode ocorrer em superfícies celulares e influir diretamente na fisiologia da própria célula, em grande parte controlada por fenômenos elétricos que ocorrem no nível da membrana. Trabalhos mais detalhados visando relacionar teoria com resultados experimentais estão em andamento.

BIO/9:00/AA.F

**PROPRIEDADES ÓPTICAS DA HEMATOPORFIRINA E DERIVADOS. Denise Mari-**

**a Zezelli, Jorge Humberto Nicola e Francisco B.T. Passinet (Departamento de Es-**  
**tado Sólido e Ciência dos Materiais, do Instituto de Física) ; \* Departamento de**  
**Físico-Química, do Instituto de Química, da UNICAMP).**

A classe médica internacional tem voltado sua atenção nos últimos anos para uma nova terapia, alternativa, no tratamento de câncer, a chamada Terapia Fotodinâmica de Câncer (PDT). O processo baseia-se no fato de que tecidos malignos, por seu particular metabolismo, absorvem e/ou retêm determinados corantes da família das porfirinas que tenham sido injetados no paciente via venosa. Através de excitação óptica ressonante, estes corantes fluorescem possibilitando a detecção e delimitação de tumores, e estimulando reações químicas, causando destruição tecidual bastante localizada. Vários corantes têm sido investigados (protoporfirina, ftaocianina, etc.), entretanto os mais utilizados nesta terapia têm sido a hematoporfirina e seus derivados.

Foram registrados os espectros ópticos da hematoporfirina e um derivado em solução aquosa, em ácido acético e acetona. Os espectros de absorção e fluorescência forneceram as localizações de ressonância e de emissão fluorescente, o que forneceu subsídios para o entendimento do espectro de emissão via excitação laser, também registrado.

BIO/9:20/AA.F **DINÂMICA DA REAÇÃO LIGANTE HEMOGLOBINA - Marília P. Linhares, Léa J. El-Jaick, George Bemski e Eliane Wajnberg (CBPF e \*IF-UFRJ).**

Hemoglobina (Mb) e Hemoglobina (Hb) são modelos para o estudo das proteínas. A reassociação do CO com o Mb foi observada por Austin et al (1) que postularam a existência de subestados conformatoriais. Para temperatura (T) maior que um dado  $T_0$ , uma molécula de proteína move-se rapidamente entre os diferentes subestados, variando continuamente a sua estrutura; para  $T < T_0$  cada molécula permanece presa a um particular subestado. Modelos teóricos têm sido propostos relacionando a barreira de energia potencial (E) da reação ligante-proteína com a configuração da proteína. Nós ajustamos as curvas de reassociação para  $T = 100, 140$  e  $180K$  da Hb da Carpa (2) utilizando 3 modelos (1,3,4) e encontramos resultados mostrando que os 3 modelos servem igualmente para Mb e Hb para  $T < T_0$ . Estamos realizando experiências com RPE de fotodissociação do ligante NO da Hb humana. Em uma experiência típica para  $T = 14K$ , 51% dos ligantes foram dissociados em 3,8 minutos e 9,3% reassociaram depois de interrompida a iluminação. Os modelos teóricos não ajustaram bem a curva experimental nesta T onde existe a possibilidade de tunelamento quântico. Neste caso a constante da reação é  $k = A\omega \exp[-\pi d(2M^2/2\hbar)]$  onde  $A$  é o fator de frequência,  $d$  a largura da barreira de energia e  $M$  a massa reduzida do Ferro e do ligante NO. Estamos refazendo os ajustes das curvas experimentais obtidas e pretendemos obter novos resultados para uma faixa de T entre 6K e 30K.

1) R.H.Austin et al, Biochemistry 14 (1975) 4344 - 2) W.G.Cobau et al, Biophys. J. 47 (1983) 781 3) N.Aggmon et al, J.Chem. Phys. 79 (1983) 2042 4) R.D.Young et al, J.Chem. Phys. 81 (1984) 3730.

BIO/9:40/AA.F **"MODULAÇÃO PELO GRAU DE HIDRATAÇÃO DA SIMETRIA DE CAMPO CRISTALINO E ESTADO DE SPIN DO ION FERRO EM HEMOPROTEÍNAS". Ladislau Martin Neto, Sérgio Mascarenhas (EMBRAPA-UAPDIA), Rosemary Sanches, Marcel Tabak e Otaciro R. Nascimento (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP)**

Em continuidade ao estudo por Resonância Paramagnética Eletrônica (RPE) do acompanhamento de alterações no centro ativo (heme) de hemoproteínas moduladas pela variação do grau de hidratação apresentamos resultados obtidos para a metá Mb e Nitroso-Mb de baleia e metá Hb bovina. Amostras com diferentes graus de hidratações (0 a 50% em peso) foram obtidas e submetidas as medidas de RPE, à  $T = -160^\circ C$ , em um espetrómetro Varian E-109 Banda X (9GHz). Para as duas proteinas, na forma metá, os espectros caracterizam-se por linhas de absorções com os seguintes valores de g: g=6, g=4,3 e g=2, do ion ferro (III) em diferentes estados de spin e simetrias, e g=2,01 devido a um radical livre criado no processo de desidratação. Algumas das observações das amostras em diferentes hidratações foram: a) variação monótona da largura (p/ metá Mb) e intensidade (p/ metá Mb e metá Hb) da linha de absorção do ion ferro (III) com g=6 (simetria axial). A partir dessas observações ficou evidenciado, para a metá Mb, o valor de hidratação de 0,20gr H<sub>2</sub>O/grMb como um valor crítico para o processo de estabilização da conformação da proteína "nativa"; b) coexistência de dois estados de spins ([5/2 (metá) e 1/2 (hemicromo)]) para amostras em baixa hidratação; c) a intensidade da linha de absorção do radical livre decresce com o aumento do grau de hidratação. Incluiu-se também medidas utilizando o monóxido de nitrogênio (NO) como sexto ligante para a Mb de baleia. O sinal de RPE monitorado para este derivado (Nitroso-Mb) é do próprio grupo NO e alterações significativas não observadas nas amostras em diferentes hidratações.

**BIO/10:15/4A.F** ESTUDOS DE ESPECTROSCOPIAS INFRAREMELHA E FOTO-ACÚSTICA DE HEMOGLOBINAS HUMANAS DOS TIPOS A E SS E HEMOGLOBINA DE RANA catesbeiana. Niusa Aparecida Marigheto, José Inácio Cotrim Vasconcellos (Instituto de Física) e Nilce Correa Meirelles (Instituto de Biologia) -UNICAMP

São feitos estudos espectroscópicos experimentais de hemoglobinas humanas dos tipos A e SS e de hemoglobina de Rana catesbeiana através de duas técnicas: 1- Espectroscopia de absorção linear na região de 2000 Å a 40000 Å utilizando espetrofotômetros. Na região de 2000 Å a 7000 Å (região visível do espetro) as amostras estão na forma de soluções aquosas. Após ... 13000 Å, a forte absorção da água impede que se utilize soluções aquosas. Utiliza-se então uma pastilha de KBr opticamente perfeita na qual a amostra é inserida. Com esta técnica os espetros são estendidos de 13000 Å a 40000 Å. Procura-se também obter espetros das amostras de hemoglobina na região de 2000 Å a 13000 Å também com a pastilha de KBr para efeito comparativo. Comparações entre as diferentes hemoglobinas nas mesmas regiões espetrais são feitas. 2- Espectroscopia Foto-acústica na região de 2000 Å a 7000 Å. Poderíamos estender tal espetro até 18000 Å, mas o espetro (tal qual o visível) não apresenta nenhuma linha de absorção.

Após a obtenção dos dados experimentais procedemos a análise teórica das novas linhas obtidas efetuando uma comparação entre as hemoglobinas de diferentes espécies e de diferentes tipos.

**BIO/10:35/4A.F** ESTUDO DA TOLERÂNCIA DE PLANTAS DE MILHO AO ALUMÍNIO TÓXICO, UTILIZANDO-SE ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA "IN VIVO". C.A.Vinha (Dept. Física-UFMS), D.A.B.Serra (IFGW-UNICAMP), William José da Silva (IB-Unicamp).

O objetivo do trabalho é identificar os efeitos do alumínio tóxico existente no solo sobre a ocorrência de Clorofila nas folhas de plantas de milho sensíveis e tolerantes à ação tóxica desse metal. É utilizada a espectroscopia fotoacústica na região do visível, sendo de particular interesse o pico da Clorofila a, centrado em 680nm. São realizadas análises "in vivo" utilizando-se uma célula fotoacústica apropriada.

**BIO/10:55/4A.F** IDENTIFICAÇÃO DOS PADRÕES DE BEBIDAS DE CAFÉ, UTILIZANDO-SE ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA E RESSONÂNCIA MAGNÉTICA. C.A.Vinha (Dept. Física-UFMS), H.Vargas e E.C.Silva (IFGW-UNICAMP).

Influências regionais, tais como tipo de solo, umidade do ar, incidência de radiação solar, etc. são responsáveis pela ocorrência de diferentes sabores de bebidas de café ( Rio, Mole, Dura, etc. ) com diferentes valorizações comerciais. Atualmente a distinção é feita a partir da análise subjetiva da "prova de gosto" realizada por provedores profissionais. O objetivo do trabalho é tentar distinguir os padrões de bebidas através da análise espectral do pó de café torrado, utilizando-se espectroscopias no IR próximo, ressonância paramagnética e ressonância magnética nuclear.

**BIO/11:15/4A.F** "CARACTERIZAÇÃO E FORMAÇÃO DE RADICAIS LIVRES NA MOLECULA DE 2,2,6,6-TETRAMETIL 4 - PIPERIDONE, UTILIZANDO A TÉCNICA DE EPR E RAIO X."- Eneida Figueiredo Koury, Marcel Tabak e Otacílio Rangel Bascimento. (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP).

Uma linha de pesquisa recentemente implantada no laboratório de Biofísica de São Carlos, trata da investigação das características espectroscópicas (EPR) de radicais livres produzidos pela radiação em moléculas orgânicas, particularmente precursores de marcadores de spin. O 2,2,6,6 - tetrametil - 4 - piperidone<sup>(1)</sup>, que é diamagnético, quando oxidado, se transforma no spin label nitroxídeo 2,2,6,6 - tetrametil - N - oxyl (Tempone).

Irradiando o cristal diamagnético com raio X, centros paramagnéticos são criados, possibilitando a utilização da técnica de EPR na sua caracterização. Foram feitas medidas da variação angular do campo magnético em relação ao cristal à temperatura ambiente. Para uma melhor resolução espectral, as medidas foram também realizadas à temperatura do nitrogênio líquido. O espectro obtido consiste de 6 linhas, com um desdobramento dubletô maior e um desdobramento triplo menor. Observa-se também desdobramentos adicionais secundários, particularmente em campo baixo, o que pode estar relacionado com um outro centro paramagnético.

Estamos calculando os valores de g e A, e observando a variação do espectro com a temperatura em um determinado ângulo, para identificar o centro paramagnético na molécula (1).

**BIO/10:35/4A.F** "EPR DO ION Cu<sup>2+</sup> EM TRIPTOFILGLICINA". Carlos A.F. Pintão e Otacílio Rangel Bascimento. Instituto de Física e Química de São Carlos - USP.

Sabe-se que diversos resíduos, ou cadeias laterais, que compõem uma proteína possuem grupos ativos que podem se complexar com metais de transições, onde isto depende do pH e da relação estioquímica envolvida. A importância dos estudos destes complexos se encontram na função que podem exercer nos organismos vivos. É o caso da hemoglobina, proteína complexada com Fe, exercendo o papel de transporte de oxigênio no sangue e o da hemoceanina. Esta última é uma proteína complexada com Cu<sup>2+</sup> que realiza o transporte de oxigênio nos invertebrados marinhos. Um número muito grande de possibilidades de coordenação podem ocorrer, dependendo dos resíduos de amino-ácidos participantes. A formação de complexos de Cu<sup>2+</sup> com pequenos peptídeos possibilitam o estudo dessas possíveis coordenações e disto tirar informações mais conclusivas e raspiro de complexos de Cobre com grandes peptídeos ou proteínas. Neste trabalho, utiliza-se o triptofilglícina para estudar a influência do resíduo lateral posso sobre a estereoquímica dos complexos formados com o Ión Cu<sup>2+</sup>. Medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) e Absorção Ótica no visível, a temperatura ambiente e Nitrogênio líquido foram realizadas em diferentes pH's. A formação de cristais possibilitaram medidas de EPR e estudos de difração de raio X. A caracterização da sua estrutura cristalina está sendo realizada.

**BIO/11:55/4A.F** "ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA DE HEMOGLOBINA LIOFILIZADA-EFEITOS DA HIDRATAÇÃO". Marilene Lopes Cornélio, Rosemary Sanches, Helton Vargas\* e Sergio Maccarenhas\*\*. IFQSC-USP,S.C., \*IFGM-UNICAMP, Campinas e \*\*EMBRAPA-UAPDIA, S.Carlos.

Nossa objetivo é estudar a importância da água para a ocorrência da oxigenação da hemoglobina e mioglobina. Conseguimos estudando a hemoglobina humana com o ligante monóxido de carbono (Hb-CO). Para controlar o conteúdo de água na amostra, a hemoglobina é liofilizada e colocada em ambientes com diferentes umidades relativas. As mudanças que ocorrem na região do grupo heme da hemoglobina podem ser identificados pelo espectro de absorção na região visível. Como nossas amostras são opacas, utilizamos a técnica de espectroscopia fotoacústica para obter estes espectros. O que se observa é que amostras mantidas até 75% de umidade relativa possuem a banda de Soret em torno de 419 nm, característica de Hb-CO. Para a amostra mantida a 93% de umidade relativa a banda de Soret está deslocada para 414 nm, o que caracteriza a hemoglobina com o ligante O<sub>2</sub>. Estes dados sugerem que, apesar de em solução a afinidade da hemoglobina por CO ser cerca de 200 vezes maior do que a afinidade por O<sub>2</sub>, para a hemoglobina na forma de pó e com hidratação suficiente é possível trocar o CO por O<sub>2</sub>. A ocorrência da troca indica que a ligação Fe-CO não é tão estável quanto em solução, enquanto que a necessidade da água sugere que para que ocorra a troca é essencial que a proteína tenha flexibilidade. Vamos procurar determinar com mais exatidão a hidratação que possibilite a relaxação conformatacional da proteína e estender o estudo para as bandas de absorção na região de 500 a 700 nm. O estudo da mioglobina servirá de controle e para investigar a possível influência da água na estrutura quaternária da hemoglobina.

**BIO/B:00/6A.F** TRANSIÇÕES DE FASE DO TRANQUILIZANTE CLOROPROMAZINA E SUA INTERAÇÃO COM BICAMADAS DE LIPÍDEOS E MEMBRANAS. Sonia Louro, Paulo Alberto Hussenweis, Marcel Tabak\*, Eliane Wajnberg\*\*. PUC/RJ, \*IFQSC, \*\*CBPF.

Tranquilizantes e anestésicos, em geral, são moléculas anfifílicas que agem através de interação com membranas. Com o objetivo de esclarecer esta interação vários trabalhos, utilizando diversos fármacos, têm sido realizados. Ainda assim o mecanismo de ação destas drogas continua obscuro. Neste trabalho estudamos as propriedades da cloropromazina (CPZ) em solução e sua interação com sistemas de lipídios e com membranas biológicas, através da técnica de marcadores de spin. Utilizando um marcador derivado do ácido graxo encontramos uma concentração molar crítica da ordem de 0,3 mM de CPZ. Nestas micelas o marcador se encontra totalmente imobilizado. Em concentrações mais altas há uma transição de fase detectada pelo aparecimento de um espectro de ESR de marcadores fracamente imobilizados. Esta transição depende fortemente do pH da solução. A transição é favorecida com a diminuição do pH. Foram feitas medidas do efeito da CPZ sobre o tempo de correlação de marcadores incorporados a vesículas de lipídios e ligados a proteínas de membranas de eritrócitos.

**BIO/B:20/6A.F** PROPRIEDADES DE AGREGAÇÃO DO ANTIBIÓTICO ANFOTERICINA B: APLICAÇÃO DE TÉCNICAS FÍSICAS. - M. Teresa Lamy-Freund, Verginia F.N. Ferreira e Shirley Schreier. Departamento de Bioquímica, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, C.P. 20780, São Paulo, Brasil.

Anfotericina B (AB) é utilizada no tratamento de infecções micóticas sistêmicas, agindo a nível de membrana celular, causando alterações de permeabilidade. Para fins clínicos a solubilidade da droga em meio aquoso é aumentada através da sua complexação com o detergente desoxicolato de sódio (DOC). Nós estudamos propriedades estruturais das micelas mistas de AB: DOC através de espectroscopias da absorção ótica, dicroísmo circular e ressonância paramagnética eletrônica. Utilizando o marcador de spin 2-(3-carboxipropil)-4,4-dimetil-2-tridecil-3-oxazolidiniloxil (5-SASL) incorporado a agregados de AB: DOC e/ou a micelas de DOC, possivelmente também presentes no meio, observamos a existência de duas populações de marcador: uma fracamente e outra fortemente imobilizada. O equilíbrio entre os duas populações é dependente das concentrações de AB e DOC. É sabido que o DOC passa por diversos estágios de agregação dependendo de sua concentração no meio. Foi possível associar uma modificação da micela de DOC com a reestruturação de agregados de AB: DOC presentes no meio. Considerando que o fármaco é lentamente injetado na corrente sanguínea, a dependência do estado de agregação com a concentração pode ser um fator importante nos efeitos tóxicos e terapêuticos da droga.

Apoio Financeiro: CNPq, FAPESP e FINEP

**BIO/B:40/6A.F** DINÂMICA E ESTABILIDADE DE FILMES DE LIPÍDIOS - Nice Maria Americano da Costa Costa Pinto e Paulo Mascarelo Biach (UFBA/CBPF) - O comportamento dinâmico e a estabilidade do filme de lipídios são analisados através de um modelo hidrodinâmico adequado à simulação do filme: 3 fases líquidas incompressíveis e viscosas, caracterizadas pela densidade, permissividade elétrica e viscosidade, separadas por duas superfícies electricamente carregadas. A dinâmica do sistema é descrita através da equação de Navier-Stokes, consideradas as interações de Van der Waals, eletrostática e de curto alcance, e satisfazendo as condições de contorno nas interfaces. A solução do problema em termos do campo de velocidades, obtida por uma análise das perturbações lineares com relação ao estado estacionário, conduz a uma equação de dispersão que caracteriza a dinâmica do sistema, de qual são retirados os critérios de estabilidade do filme. Em termos da distribuição de cargas e campo elétrico são estudados dois casos: a) filme com distribuição simétrica de cargas e b) filme submetido a uma diferença de potencial.

B10/9:00/6A.F

BACTERIAS MAGNÉTICAS EM REGIME DE CAMPO MAGNÉTICO OSCILANTE

Henrique G. P. Lins de Barros e Darcí M. S. Esquivel (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas). Bactérias magnetotácticas apresentam uma interação tipo dipolo-magnético com o campo magnético externo. Um dos problemas encontrados ao estudar estes microorganismos é determinar, por vias experimentais, o momento do dipolo permanente de uma única célula. Até o momento temos como métodos, o estudo de reorientação de bactérias quando o campo é subitamente invertido, a determinação de quantidade de material magnético no interior da célula (via microscopia eletrônica) e o estudo da velocidade de migração em função do campo magnético. Estamos trabalhando na solução de problema de uma bactéria magnetotáctica submetida a um campo magnético oscilante ( $B = \sin \omega t$ ). Esta solução fornece um regime de ressonância em que a frequência e intensidade deste campo estão relacionados com o momento magnético da célula. A observação de bactérias magnetotácticas sob a ação de campos magnéticos oscilantes de baixa frequência (cerca de 10 Hz) com intensidades de cerca de 5G mostra que é possível determinar, em laboratório, o regime ressonante.

B10/9:20/6A.F

VISCOELASTICIDADE EM BIOMATERIAIS. Osamu Kinouchi Filho, Instituto de

Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13360 São Carlos - SP; Kenji Nata, Johnson & Johnson; Robert Lee Zimmerman, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo.

Certos biomateriais apresentam comportamento viscoelástico fortemente não-linear. Nesses casos a derivada  $E = d\tau/d\epsilon$  da curva tensão-deformação é função de  $\epsilon$ , a deformação total do corpo (além da umidade do ar, temperatura, etc). Um método rápido para se medir  $E$  consiste em se aplicar uma força de amplitude senoidal à amostra e determinar a frequência de ressonância mecânica do sistema.

O método foi usado para se acompanhar a transição alfa para beta da queratina do cabelo humano feita isotonicamente variando-se a umidade relativa do ar. O efeito de produtos umidificantes nessa transição está sendo investigado. Pesquisa subvencionada pela Fundação de Apoio à Física e à Química.

B10/9:40/6A.F

"ESTUDOS DE ELETRETO DE TEFLON POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA".-S1

Sérgio Crestana ( Instituto de Física e Química de São Carlos - USP).

Investigamos o eletreto de Teflon irradiado com Gama-Co60 através de medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR). Usamos amostras de Teflon em forma de "espaguete", iguais às do Dosímetro de Eletreto Cilíndrico (S. Crestana - Tess - IFQSC - USP - 1985). Carregando o eletreto de duas formas diferentes ( $-10^{-8} C/cm^2$ ) uma com descarga corona e outra com partículas alfa, estudamos através de EPR os mecanismos de "trapping" e criação de radicais livres. A amplitude do sinal de EPR mostrou ser proporcional à dose de irradiação recebida pelo Teflon. Estudamos ainda os efeitos do tratamento térmico e a evolução do sinal com variação do tempo e os primeiros resultados estão sendo comparados com os obtidos por G. Dreyfus et al nos estudos de EPR realizados em filmes de Polypropylene bombardeados com eletros ( Phys. Rev. vol 8 20, pp. 1720-1724, 1979).

CNPq.

**CRISTALOGRAFIA**

**Coord.: Aldo Craievich (CBPF)**

**CRI/8:00/AA.F** CONSTRUÇÃO DE UMA CÂMARA DE READ - Yukio Koishi (Departamento de Física do ITA, CTA, São José dos Campos, SP).

No estudo das propriedades estruturais de filmes finos por técnicas de difração de raios X, um equipamento bastante interessante é a câmara de Read<sup>1</sup>, a qual permite a exploração de uma grande região do espaço recíproco, com apenas uma exposição.

Modificações introduzidas na câmara de Read<sup>2</sup> permitem determinações de parâmetros com indeterminação de 3mÅ. Uma das aplicações importantes deste equipamento é o estudo da estrutura de filmes finos.

Apresenta-se as características de uma câmara de Read em implantação em nosso laboratório.

1. H.R. READ and G. ALTMAN, Appl. Phys. Letters, 7, 51-52 (1965).

2. S.B. QUADRI, E.J. CUBAUSKAS and Z.R. CARPENTER, Rev. Sci. Instrum. 56(11) (1985).

**CRI/8:20/AA.F** MONOCROMADOR ULTRA-FINO PARA LUZ SÍNCRONTRON

César Cusatis - Deptº de Física - UFPR

A dissipação de energia em monocromadores para feixes de luz síncrotron de até 2 kW/cm<sup>2</sup> é um problema ainda sem solução ideal.

O comprimento de extinção para determinado comprimento de onda e para determinada reflexão é da ordem de grandeza da espessura de silício que reduz a intensidade do feixe de apenas 10% da intensidade incidente.

Logo, em vez de utilizar-se um cristal espesso e tentar dissipar toda a energia absorvida pelo monocromador, propõe-se utilizar monocromadores ultrafinos onde a maior parte da energia do feixe incidente atravessa o cristal em vez de ser absorvida, sem que a energia difratada seja muito afetada.

Serão discutidos métodos para a obtenção de cristais "perfeitos" de silício com espessura da ordem de 10  $\mu$  e áreas de algumas cm<sup>2</sup>.

Apoio CNPq e FINEP

**CRI/8:40/AA.F** RESULTADOS PRELIMINARES DE UMA NOVA TÉCNICA DE MEDIDA DE DISPOSIÇÃO ANÔMALA COM MONOCRISTAIS

A. RICARDO D. RODRIGUES\* e IRINEU MAZZARO (UFPR).

A Teoria Dinâmica da Difração de Raios-X mostra que o pico de difração em caso Bragg é deslocado angularmente em relação aquela no caso Laue. Este desvio é diretamente proporcional à parte real do fator de estrutura  $F_0$  da amostra cristalina, sendo da ordem de segundos de arco.

Foram construídos dispositivos ópticos monocrystalinos (de Silício e de Germanio), que permitem difratar o feixe incidente nas condições de Laue e de Bragg pelos mesmos planos e simultaneamente. Medidas dos perfis da difração de ambos os feixes foram realizadas para alguns comprimentos de onda do Raio-X, obtendo-se daí os valores de dispersão anômala ( $f'$ ). Serão apresentados os resultados preliminares destas medidas para o Silício e Germanio.

Apoio: Capes e Finep.

\* DFCN-IFUSC-USP e LNLS.

CRI/9:00/4A.F

## CARACTERIZAÇÃO E SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS PARA DETECTOR SENSÍVEL A POSIÇÃO

A. Franca Barbosa - C B P F

Experiências para caracterização do desempenho de um detector sensível a posição serão apresentadas, juntamente com um projeto de baixo custo para a aquisição de dados nesse tipo de detectores

CRI/9:20/4A.F MONOCROMADOR MONOLÍTICO DE SILÍCIO À QUATRO REFLEXÕES COM SUPRESSÃO DOS HARMÔNICOS PARA RADIAÇÃO SINCRotron. Zbigniew Baran, Instituto de Física, UFSC.

Relataremos brevemente como calculamos e fabricamos um monocromador monolítico à quatro reflexões com alta supressão dos harmônicos para radiação sincrotron de  $\lambda = 2,29\text{\AA}$  realizado no Laboratório de Radiação Síncrotron, LURE e Orsay. Cortando os canais não paralelos no cristal perfeito de silício, uma superposição dos perfis de difração dinâmica, refletidos por dois cristais é cancelada para os harmônicos, enquanto uma superposição parcial para um comprimento de onda fundamental é mantida. Assim fabricado, o monocromador com os canais que fazem os ângulos  $0^\circ$  e  $10^\circ$  com o plano refletor (III) forneceu um feixe fundamental de  $\lambda = 2,29\text{\AA}$  e com uma taxa de contaminação de harmônicos menor que 0,4%. Como esta taxa foi grande demais para nossa aplicação particular, calculamos um segundo monocromador do mesmo tipo mas com o plano refletor (311), ângulo de assimetria igual a  $25^\circ$  e com a taxa de contaminação de apenas 0,08%. Esse segundo monocromador será fabricado na UFSC em colaboração com o prof. C. Cunat. Concluímos que os monocromadores monolíticos cortados assimetricamente podem fornecer um feixe fundamental pouco contaminado por harmônicos sem o uso de um mecanismo de controle de ângulo.

CRI/9:40/4A.F

## DETERMINAÇÃO DAS FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO PARCIAIS POR SUBSTITUIÇÃO ISOMÓRFICA. GEORGE HUMBERTO BEZERRA ( IFUSP )

POR UMA ÚNICA MEDIDA DE ESPALHAMENTO DE RAIOS-X DE UMA LIGA BINÁRIA AMORFA, PODEMOS DETERMINAR A FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO RADIAL TOTAL, QUE É A SOMA DE 3 FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO PARCIAIS (DISTRIBUIÇÃO DOS PARES AA, AB, E BB DE UMA LIGA A-B). PARA A DETERMINAÇÃO DESSAS FUNÇÕES PARCIAIS PRECISAMOS DE 3 MEDIDAS INDEPENDENTES. UMA FORMA DE DETERMINAÇÃO DESSAS FUNÇÕES PARCIAIS PODE SER FEITA POR SUBSTITUIÇÃO ISOMÓRFICA (SUBSTITUIÇÃO DE UM ELEMENTO POR OUTRO DE NÚMERO ATÔMICO DIFERENTE MAS DE NATUREZA QUÍMICA SEMELHANTE). SERÃO APRESENTADOS TANTOS DE ESPALHAMENTO DA LIGA "BINÁRIA" ( $Zr-Al_2O_3$ ) COM SUBSTITUIÇÃO DE  $Zr$  POR  $Hf$  EM DIFERENTES PORCENTAGENS; SERÃO AVALIADAS AS FUNÇÕES PARCIAIS DOS PARES  $Zr-Zr$ ;  $Zr-O$  e  $O-Al$ . TAIS RESULTADOS SERÃO OBTIDOS COM CÁLCULOS ESTRUTURAIS TEÓRICOS.

CRI/10:15/4A.F

## ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS EM COMPOSTOS DO TIPO A<sub>2</sub>MX<sub>6</sub> POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X.

NOME: EDMARO ANTONIO GUIMARÃES COSTA

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA - INSTITUTO DE FÍSICA

Os hexa halogenetos de metal, compostos do tipo A<sub>2</sub>MX<sub>6</sub> (A-metal alcalino ou molécula de amônia, M=metal e X=halogênio) possuem uma estrutura fcc-D<sub>0</sub> (Fm3m), em altas temperaturas.

A maioria desses compostos experimenta uma ou várias transições de fase do tipo estrutural com o abaixamento da temperatura. A instabilidade da estrutura deve-se aos diferentes raios iônicos do octaedro MX<sub>6</sub> e do metal alcalino, bem como às distâncias intermoleculares. As várias temperaturas de transição são, em geral, bem conhecidas na literatura. Faltam, porém, informações sobre as estruturas resultantes de um grande número desses compostos após as transições de fase e dentre elas podemos citar: K<sub>2</sub>ReBr<sub>6</sub>, K<sub>2</sub>TeBr<sub>6</sub>.

O K<sub>2</sub>ReBr<sub>6</sub> experimenta quatro transições nas temperaturas de 269K, 257K, 246K e 225K, e os resultados obtidos por espetrometria Raman, por si só, não fornecem informações a respeito das estruturas resultantes, uma vez que as temperaturas de transição têm valores muito próximos para produzir mudanças significativas nos espectros.

Para o K<sub>2</sub>TeBr<sub>6</sub> são conhecidas três transições de fase nas temperaturas de 434K, 405K e 234K e uma estrutura monoclinica com grupo espacial C<sub>2</sub> (P<sub>2</sub>/n) em temperatura ambiente. Os estudos por meio do espalhamento Raman parecem indicar uma outra transição estrutural, em temperatura inferior a 100K.

Pretende-se por meio da difração de raios X, fornecer uma contribuição ao entendimento das transições de fase desses compostos buscando o esclarecimento dos pontos obscuros citados. Serão empregados o método po e o método de precessão para monocrristais em baixas temperaturas.

CRI/10:35/4A.F TRANSIÇÕES ESTRUTURAIS DE FASES EM C<sub>21</sub>H<sub>44</sub> E C<sub>23</sub>H<sub>48</sub>: Romeu A. Pereira e Aldo F. Craievich, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq.

Em um estudo de análise térmica diferencial (DTA) da parafina C<sub>23</sub>H<sub>48</sub>, cinco picos correspondentes a transições de fases foram observados. Nos estudos por difração de raios X realizados até o presente três transições foram associadas com variações estruturais: cristal-rotador I-rotador I-rotador II e rotador II-líquido. Neste trabalho são apresentados novos resultados de difração de maior resolução correspondentes a C<sub>23</sub>H<sub>48</sub>, que permitem estabelecer as variações estruturais associadas aos picos de DTA restantes. Foi estudada nas mesmas condições também a parafina C<sub>21</sub>H<sub>44</sub>. (1) G. Ungar, J. Chem. Phys., 87, 689 (1983).

CRI/10:55/4A.F OBSERVAÇÃO DIRETA DA DIFRAÇÃO BRAGG-SUPERFÍCIE  
N.L.SANJURJO e C.Campos; Inst. de Fís. Gleb Wataghin - UNICAMP - Campinas - SP

A difração múltipla dos raios-X normalmente se refere ou a difração tipo Bragg-Bragg ou a Bragg-Laue. Neste trabalho relataremos a situação limite entre estes dois casos, chamado Bragg-superfície. Na geometria de Renninger, para produção de difração múltipla, o plano de incidência primário coincide com o plano do difratômetro. Assim, a observação da intensidade espalhada fica restrita ao feixe primário difratado.

Apresentamos aqui uma nova geometria de difração, em que o plano de incidência secundário coincide com o plano do difratômetro, o que permite a observação direta do feixe secundário. Para isso, a direção cristalográfica primária é alinhada paralelamente ao eixo  $\omega$  do difratômetro de monocrystal e, posteriormente os eixos  $\omega$  e  $\Omega$  são fixos em 20° para a reflexão secundária. Finalmente, o nó recíproco primário é levado sobre a esfera de Ewald por uma rotação  $\chi$  previamente calculada. Desta maneira, o número de feixes secundários observáveis depende da simetria da direção cristalográfica primária. Serão apresentados os casos de difração Bragg-superfície no Si (111) para o caso de três feixes (222) (111) (000) e dois feixes (111) (000). Também os casos de tres feixes (400) (246) (000) e quatro feixes (400) (220) (220) (000), para o filme InGaAsP/InP (100) crescido por LPE. Será apresentada a montagem experimental e discutida a natureza da propagação. (CNPq, Telebrás).

CRI/11:15/4A.F DETERMINAÇÃO DAS FASES NA DIFRAÇÃO DOS RAIOS-X USANDO DIFRAÇÃO MÚLTIPLE DE MAIS DE TRÊS-FEIXES. José Marcos Sasaki e Shih-Lin Chang (Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

O problema da fase na difração dos raios-x é um dos problemas mais importantes e atuais ligado à cristalografia. Foram propostos vários métodos experimentais para apresentar um solução física a este problema. Baseado na técnica da difração dos raios-x juntamente com as interações dinâmicas e com a rotação relativa da rede cristalina com respeito a esfera de Ewald, Chang propôs em 1982 uma nova técnica para determinação da fase a partir da intensidade refletida, usando um cristal com centro de simetria. Uma das grandes dificuldades que se apresenta atualmente é a determinação da solução analítica da equação de dispersão para um caso geral de N-feixes. Ao expandir a equação de dispersão na forma matricial, produtos de  $N$ ,  $N-1$ ,  $N-2$ , ..., 3 ( $N \geq 3$ ) fatores da estrutura e polarizações aparecem naturalmente. Cada um desses produtos de fatores de estrutura corresponde no espaço reciprocó a um polígono fechado. Propomos neste trabalho, o estudo dos problema da fase tratando geometricamente cada caso de difração múltipla através da decomposição em polígonos fechados, sempre respeitando a conservação do momento. A teoria dinâmica da difração dos raios-x juntamente com a análise da assimetria do perfil de linha, rotação do cristal no espaço reciprocó e o efeito da polarização, foram os parâmetros utilizados para se chegar a uma nova expressão para o sinal da fase invariante. Na parte experimental foi utilizado radiação cujo comprimento de onda se situa acima da borda de absorção do átomo mais pesado constituinte do cristal. (CNPq - TELEBRAS)

CRI/11:35/4A.F INFRARED OPTICAL PROPERTIES AND VIBRATIONAL STRUCTURE IN SINGLE CRYSTALS OF Ba[Fe(CN)<sub>5</sub>NO].3H<sub>2</sub>O. By O.E. Piro, Depto de Física, Ftad de C.Exactas (FCE), Univ. Nacional de La Plata, (UNLP), C.C.67, 1900 La Plata, Argentina, E.E. Castellano, Instituto de Física e Química de São Carlos, Univ. de São Paulo, C.P. 369, 13.360 São Carlos, Brasil, S.R. González and P.J. Aymonino, Depto de Química, FCE, UNLP.

The values of the optical parameters along the crystal  $a$  axis are obtained by Kramers-Kronig dispersion relations analysis from the transversal-elastic reflectance spectra on the (001) crystal face of the title compound, in the range 250-3000 cm<sup>-1</sup>. These values are used to determine the transversal and longitudinal vibrational frequencies of the strong optic NO stretching mode and are also employed to predict the position and shape of the NO reststrahlen band for transversal magnetic off-axis reflectance on the crystal (100) face. A least-squares fitting to the experimental reflectance based on a classical damped harmonic oscillator in the NO stretching region, provides an estimation of the transition strength of this intramolecular vibration, which is in good agreement with the value derived from spectroscopic effects due to intermolecular dipole-dipole interaction between NO vibrations in Ba[Fe(CN)<sub>5</sub>NO].3H<sub>2</sub>O and Sr[Fe(CN)<sub>5</sub>NO].4H<sub>2</sub>O isotropic mixtures (González, Piro, Aymonino and Castellano, Phys. Rev., 1986, B 33, 5818-5824).

CRI/11:35/4A.F OPTICAL PROPERTIES, REFLECTANCE AND TRANSMITTANCE OF ANISOTROPIC ABSORBING CRYSTAL PLATES. O.E. Piro, Physics Depts of IFQSC, USP and of UNLP, Argentina.

The optical properties of strongly absorbing orthorhombic (and higher symmetric, uniaxial) crystals are considered. Expressions for the amplitude reflection and transmission coefficients of crystal plates with smooth surfaces parallel to principal planes are presented. Equations for the reflectance and transmittance of crystal layers with rough surfaces are also derived. The expressions are presented in a form that facilitates their computational implementation and their ready comparison with the known formulas corresponding to films of isotropic media. The practical interest of the derived equations for their applications in absorption spectroscopy of solids emphasized. A detailed, quantitative description of the contribution to the TM-polarized, off-axis infrared absorption spectrum of anisotropic crystal plates due to polar longitudinal optic vibrations will be given.

CRI/8:00/5A.F

UMA NOVA UNIDADE DE ESPALHAMENTO NA DIFRAÇÃO DINÂMICA DE RAIOS-X  
H.S.Campos e W.A.Keller - Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.

Um plano de dipolos induzidos é considerado como uma unidade básica de espalhamento dinâmico de raios-X, no caso de dois feixes. Como uma extensão da unidade formada por um único dipolo, a unidade introduzida mantém o princípio da auto-consistência de Ewald além de levar em conta a conservação da energia. De imediato são encontradas algumas características do espalhamento dinâmico usualmente descritas para todo um cristal. Definindo-se um "complex tie point" é derivado analiticamente um comportamento hiperbólico com os saltos em fase, para os estados conjugados de vibração. O tratamento matemático dessa derivação é estendido para a região de espalhamento cônico. A equivalência entre a auto-consistência e a conservação da energia é provada de ambas maneiras.

\* Apoio financeiro CNPq e FINEP

CRI/8:20/5A.F

AUTO-CONSISTÊNCIA E CONSERVAÇÃO DA ENERGIA NO ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO DE DUAS ONDAS - W.A. Keller, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.

O espalhamento de duas ondas eletromagnéticas planas por um plano de dipolos induzidos é rigorosamente tratado com o uso do vetor de Hertz. É mostrado que somente uma solução auto-consistente que leva em conta efeitos cooperativos entre os dipolos, resulta na conservação da energia. Através de coeficientes complexos de transmissão são definidas as graduais variações de amplitude e de fase para as duas ondas espalhadas. Considerando dois estados de vibração, quer dizer, as ondas incidentes atingem o plano de dipolos em fase e com fases opostas, os correspondentes saltos em fase revelam um comportamento idêntico ao previsto na teoria dinâmica de difração de raios-X. Entretanto como a relação entre esses estados é derivada exclusivamente na forma analítica, o uso convencional de argumentos geométricos e de ondas esféricas torna-se aqui redundante.

\* Apoio financeiro CNPq e FINEP

CRI/8:40/5A.F

MAXIMUM LIKELIHOOD DETERMINATION OF PARAMETERS FOR POWDER, LAUE AND DIVERGENT BEAM PATTERNS - Edmund Ratejczyk and W.A.Keller, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.

A general approach for any experimental arrangement is developed in which a number of directly measured magnitudes or data is used to calculate a substantially smaller number of parameters considered as results. A mathematical model of experiment is set up which enables one essential reverse calculations of the "theoric" values of the whole data set. Some additional parameters are necessarily introduced to complete the mathematical model. The calculations are realized by a numerical procedure unique for the experiment of interest. Convergence of the procedure is checked by a minimum variance criterium based on the assumption of the normal distribution of all the measured magnitudes. For each particular data set a linear statistical model is postulated. The maximum likelihood or "best" values of all the parameters together with their standard deviation are defined under validity of the linear model. The limit value of the variance sets the overall precision effectively attained in the particular realization of the experiment. The procedure has been applied for the powder, Laue and divergent beam techniques.

\* Partly supported by FINEP

CRI/9:00/5A.F | ESTRUTURA CRISTALINA DO FOSFATO FÉRRICO DI-ÁCIDO.  
I. Vencato (Dept. Física-UPSC), E. Mattievich e Lígia de F. Moreira (IF-UFRJ)  
e Y. P. M ascarenhas (IFQSC-USP)

O composto sintético  $\text{Fe}^{3+}(\text{PO}_4\text{H}_2)_2(\text{OH})$  é monoclinico, grupo espacial  $P2_1/c$ ,  $a = 5,191(2)$ ,  $b = 8,748(2)$ ,  $c = 14,448(2)\text{\AA}$ ,  $\beta = 94,81(2)^\circ$ ,  $Z = 4$ ,  $d_c = 2,69 \text{ g.cm}^{-3}$ ,  $V = 653,79 \text{ \AA}^3$ ,  $\mu = 26,62 \text{ cm}^{-1}$ .

Foi utilizado um cristal rosa claro de dimensões  $0,35 \times 0,08 \times 0,06 \text{ mm}^3$ , medindo-se 1140 reflexões com um difratômetro automático CAD-4 e radiação MoK $\alpha$ . Foi feita correção por  $Lp$  e por extinção secundária. A estrutura foi resolvida por Métodos Diretos com MULTAN-80 e refinada por mínimos quadrados até o índice  $R = 0,058$  para 976 reflexões observadas, com  $I > 3\sigma(I)$ .

A estrutura consiste de íons de  $\text{Fe}^{3+}$  coordenados por ligantes ( $\text{PO}_4\text{H}_2$ ) formando octaedros que se conectam entre si através dos vértices de grupos fosfatos. O grupo  $(\text{OH})^-$  livre encontra-se ligado por ponte de hidrogênio a um oxigênio de um grupo fosfato e sua presença foi inferida por espectroscopia de infravermelho com frequência de estiramento  $3392 \text{ cm}^{-1}$ .

Órgãos financiadores: CAPES, FAPESP, CNPq(PADCT) e FINEP.

CRI/9:20/5A.F

X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY APPLIED TO THE CHARACTERIZATION  
OF CATALYSTS  
H. DEXPERT, D. BAZIN, F. LE NORMAND, P. LAGARDE  
LURE, BSL, 20930, UPS, 91405 ORSAY, FRANCE

In the field of highly dispersed heterogeneous catalysts, EXAFS is to day an important technique very largely used. Using a dedicated experimental cell we are studying some of these materials, basically made of platinum on alumina, directly under reactive conditions, at high temperature, either during different oxidation reduction cycles or while several catalytic transformations are performed. Both conventional and time resolved experiments were undertaken so that the kinetics of the structural and electronic evolutions of these catalysts are followed. These new results define more accurately the relationships between the metallic aggregate and its environment. Particular features such as the influences of the nature of the precursor and the metal loading, the temperature and time dependance of the reaction, the correlation between the particles size and the chemical compounds issued from the reaction will be discussed.

CRI/9:40/5A.F | ESTUDO DO SISTEMA Pd-HIDROGÊNIO POR EXAFS. I.P. Cardoso\* e M. Pick,  
Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11793.

O átomo de Hidrogênio com apenas um elétron não produz retroespalhamento mensurável por EXAFS (Espectroscopia de Absorção de Raios-X), o que dificulta a sua localização na rede cristalina, por esta técnica. Entretanto, mostrou-se recentemente (B. Lengeler, Phys. Rev. Lett. (1984) 53, 74) que, quando o Hidrogênio ocupa determinada posição na rede, como é o caso no Ni (sítios octaédricos), sua presença pode ser detetada por EXAFS. Nesse caso, o átomo de H atua como uma lente, provocando um acréscimo na amplitude e deslocamento na fase da onda do fotoelétron retroespelhado pelos segundos vizinhos, quando essa onda passa pelo potencial criado pelo H. O método permite obter informação radial e angular do sítio da rede ocupado pelo H, o que leva a sua localização. Nesse trabalho, são analisadas amostras de Pd eletroliticamente carregadas com H. Apesar de ser um sistema distinto do Ni, o Pd apresenta semelhança da rede (fcc) aliado ao grande interesse no estudo da hidrogenação desse metal. Serão discutidos os resultados obtidos a partir das análises de EXAFS. No momento, estamos empenhados na elaboração de um modelo para explicar alguma dos resultados característicos ao sistema sob estudo. (CNPq).

Endereço permanente: Instituto de Física- UNICAMP, 13081, Campinas, São Paulo.

CRI/10:15/5A.F ESTUDO DA POROSIDADE E GEOMETRIA FRACTAL DE CARVÃO VEGETAL TRATADO TERMICAMENTE. J.C. de Souza, Fundação Universidade Estadual de Maringá - Iris L. Torriani e C.A. Luengo, Instituto de Física, UNICAMP.

Curvas de espalhamento de raios X a baixo ângulo foram obtidas para amostras de carvão vegetal (*pinus elliotti*) tratadas térmicamente entre 600 e 2400 °C. As intensidades espalhadas, determinadas em escala absoluta, foram utilizadas para obter a distribuição de tamanhos de poros e a área superficial interna das amostras.

O ajuste e análise detalhada das curvas de espalhamento permite o cálculo da dimensão fractal da superfície interfacial do sistema de poros com a matriz carbonosa. Estes cálculos, que estão sendo realizados para as amostras submetidas a tratamento térmico, deverão proporcionar informação sobre a evolução da estrutura de microporos e da superfície interfacial neste tipo de material carbonoso.

CAPES, CNPq, FINEP.

CIR/10:35/5A.F CINÉTICA DE AGREGAÇÃO DE SOLS DE SILICA. T. Lours e J. Zarzycki, Université de Montpellier, A. Craievich, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, D. dos Santos e M. Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos.

Foram estudadas soluções de TMOS e água em metanol a partir dos primeiros estágios de agregação do TMOS para diversas concentrações em condições ácidas e básicas, mediante a técnica de espalhamento de raios X a baixos ângulos utilizando uma fonte de radiação sincrotron (LURE). Um estudo semiquantitativo da variação do raio de geração dos agregados mostra que eles se formam pelo processo clássico de difusão. Os agregados tem estruturas fractais com dimensionalidade  $D=2,1$  nas soluções ácidas e  $D=2,6$  nas soluções básicas. As curvas de espalhamento suportam claramente o modelo fractal da estrutura apenas para os estados avançados da agregação.

CRI/10:55/5A.F ESTRUTURA DE GEIS DE SILICA UNIDOS. A. Craievich, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, D. dos Santos e M. Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos, T. Lours e J. Zarzycki, Université de Montpellier.

Geis de silica preparados a partir da hidrólise de soluções de TMOS dissolvido em metanol foram estudados por espalhamento de raios X a baixos ângulos utilizando radiação sincrotron (LURE). Os estudos feitos nos geis unidos mostram que a polimerização do TMOS produz estruturas fractais de volume ou de superfície, dependendo do pH e da proporção água/TMOS. Os geis ácidos tem estruturas de volume fractal com  $D_v=2,2$ . Os geis básicos com alto conteúdo de água, volumes fractais com  $D_v=2,6$ . Para geis básicos os resultados são consistentes com uma estrutura formada por unidades de raio  $R_m=13 \text{ \AA}$ . O envelhecimento dos geis produz o alisamento gradual das superfícies fractais.

CRI/11:15/5A.F ESTUDO DE MICELAS EM SOLUÇÃO NO SISTEMA DODECIL(LAURIL) SULFATO DE SÓDIO (SLS)  
EM ÁGUA POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X EM BAIXO ÂNGULO (SAXS): Rosangela Itri e Lia Queloz do  
Amorim (Instituto de Física da USP)

Estudamos amostras binárias isotrópicas em várias concentrações desde 4,92% de SLS a 26,25% de SLS. As curvas de espalhamento até concentração de 15% de SLS apresentam um único pico característico da função de interferência interna da micela. Efeitos de interferência entre partículas até essa concentração, não afetam a curva de SAXS de uma maneira perceptível. Da análise de Porod, estudo do fator da estrutura e da função de distribuição de distância  $p(r)$ , concluímos que até a concentração de 10% de SLS as micelas são esféricas com raio total da ordem de 25,5 Å.

Para amostras com concentrações maiores que 15% de SLS, observamos o aparecimento de um segundo pico que se torna melhor definido quanto maior a concentração do enxifílico, associado à interferência entre micelas. Da análise da variação dos picos com a concentração concluímos que não existe indicação de alteração de forma de micela até a concentração de 26,25% de SLS, mas apenas o surgimento de interação entre micelas e um possível fenômeno de agregação entre elas. A possibilidade de transição de forma esfera-cilindro ser medida pela formação de dímeros de micelas parece bastante viável.

CRI/11:35/5A.F SAXS STUDIES OF CROTAMINE SOLUTIONS AT pH=4.5. J.R. Beltran, Y.P. Masa-  
renhas, A.F. Graievich (Instituto de Física e Química de São Carlos, C.P. 369, 13.560, São Car-  
los, SP, Brazil) and G.J. Laure, Fac. de Med. de Ribeirão Preto, São Paulo, Brazil).

Crotamine, a neurotoxin isolated from the Brazilian rattlesnake *Crotalus durissus terrificus*, is a polypeptide toxin strongly basic ( $\text{pH}_i = 10.3$ ) with 42 residues of common amino acids including six halfcystines. It has a very high lysine (9 residues) and low arginine (2 residues) content. The N-terminal is tyrosine and C-terminus glycine. It has been sequenced by J.C. Laure (Hoppe-Seyler's Physiol. Chem. 356, 213-215 (1975) who also localized the four cystine bridges (Collected Abst., SEPC, Annual Meet., 1980). In previous work (Biophys. J. 47, jan. 1985, 33-35) we determined the apparent radii of gyration as function of pH. In this work we obtained the SAXS curves at  $\text{pH} = 4.5$  and the following molecular parameters could be derived: radius of gyration = 15.3(6) Å, max. dim. = 40.0(2) Å, volume = 20200 Å<sup>3</sup>, surface = 3200 Å<sup>2</sup>. From this data we had the indication that the molecular shape should be of a oblate ellipsoid with  $a = b = 22.8$  Å,  $c = 8.4$  Å e  $c/a = 0.37$ . Using O. Glatter program the pair distribution function was calculated and the curve found was not that expected for a perfect oblate ellipsoid. A molecular model was then proposed taking in consideration a rough shape as suggested by the secondary structure predicted by Chou and Fasman and hydrophobicity profiles methods. Work sponsored by CNPq, FAPESP and FINEP.

CRI/11:55/5A.F ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE ESMERALDAS DE SANTA TEREZINHA DE GOIÁS  
Carlito Lariucci (Departamento de Física - UFG) e Regina Helena de Almeida Santos (Instituto de  
Física e Química de São Carlos - USP)

A sequência ao trabalho iniciado em 1985, sobre esmeraldas de Santa Terezinha de Goiás, levou a obtenção dos resultados aqui expostos.

As medidas do Índice de refração, usando o método de imersão resultaram em:  $n_e$  e  $n_o$  variando de 1,575 a 1,585 e 1,590 a 1,600, respectivamente.

Os parâmetros cristalográficos são:  $a=b=9,283(7)$ ,  $c=9,2092(4)$  Å,  $V=687,8(3)$  Å<sup>3</sup>, Z=2 moléculas por célula unitária,  $d_{\text{cub}} = 2,750(5)$  g/cm<sup>3</sup>, grupo espacial P<sub>6</sub>/mmc, sistema cristalino Hexagonal. A resolução da estrutura levou à localização de uma molécula de água na posição (0, 0, 1/4) e um íon (Na, Ca, ...) na posição (0, 0, 0). As principais distâncias interatômicas encontradas foram: Al-O(2) = 1,947(1), Be-O(2) = 1,654(1), Si-O(1) = 1,618(1), Si-O(2) = 1,608(1) e (Na, Ca, ...)-O = 2,302(1) Å.

O alumínio tem coordenação octaédrica enquanto que o berílio e silício tetraédrica.

Com o objetivo de verificar qual íon está coordenado à água, recorreu-se a análise química completa, a qual encontra-se em andamento.

Órgãos Financiadores: CAPES, CNPq, FINEP, FAPESP.

**DEFEITOS, CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS**  
**Coord.: - Spero Penha Morato (IPEN)**

DEF/8:00/4A.F]

**DEFEITOS SUPERFICIAIS DE ORIGEM EXTRÍNSECA OBSERVADOS EM FILMES FINOS DE GaAs CRESCIDOS PELA TÉCNICA DE EPITAXIA POR FEIXE MOLECULAR.**

Marcus Vinicius Baeta Moreira e Alfredo Contijo de Oliveira

Dept. de Física - UFMG

Defeitos superficiais de origem extrínseca em camadas de GaAs crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular foram observados utilizando um microscópio ótico de contraste de fase e microscopia eletrônica de varredura (SEM). Foram identificados uma série de defeitos, tais como "whiskers", "hillocks", elipsóides (20 a 150 µm de semi-eixo maior e 15 a 65 µm de semi-eixo menor) e defeitos ovais (três tipos de variedades: com núcleo macroscópico, com buraco e sem buraco). Uma análise semi-quantitativa por micro-sonda revelou que enquanto os "whiskers", elipsóides e defeitos ovais com núcleo originam-se de partículas contaminantes, os defeitos ovais com e sem buraco e "hillocks" parecem originar-se das condições de crescimento e/ou partículas microscópicas.

DEF/8:20/4A.F

**CRESCIMENTO DE HETEROESTRUTURAS DE GaIn<sub>x</sub>As/GaIn<sub>y</sub>As PELA TÉCNICA MOVPE À BAIXA PRESSÃO. - Marco A.Sacilotto e Aldionso M.Machado (CPqD-TELEPARÁS), Renzo A.Masut (INRC-CANADA).**

MOVPE (Metal-organic vapour-phase epitaxy) é uma técnica de crescimento muito importante, atualmente, para o crescimento de camadas epitaxiais com interfaces bastante abruptas que sejam da ordem de 2-3 monocamadas atómicas. Heteroestruturas tensionadas de GaAs/GaIn<sub>x</sub>As sobre substratos de GaAs e GaIn<sub>x</sub>As/GaIn<sub>y</sub>As sobre substratos de InP foram crescidos pela-técnica MOVPE à baixa pressão (40 torr). Apresentamos neste trabalho os detalhes desta técnica de crescimento, assim como alguns resultados de caracterização em andamento que englobam Auger, fotoluminescência, desbaste em ângulo, etc.

DEF/8:40/4A.F

**SUPER-REDES DE DOPAGENS EM SEMICONDUTORES PREPARADAS POR MBE - Ivan Frederico Lupiano Dias e Alfredo Contijo de Oliveira - Universidade Federal de Minas Gerais. - Departamento de Física**

Super-redes por dopagem em materiais semicondutores III-V são estruturas obtidas pelo crescimento periódico de camadas muito finas (10 - 300 Å) de uma liga III-V (GaAs) com alternância da dopagem tipo n(Si+) e tipo p(Be). As regiões de carga espacial resultantes provocam uma modulação das bandas de energia dando origem a um "gap de energia indireto no espaço real" e em consequência os portadores de carga livre - elétrons e buracos - não espacialmente separados engendrando uma distribuição em não equilíbrio meta-estável. Isto tem implicações diretas sobre as propriedades elétricas e óticas da estrutura e quantidades como a concentração de portadores, o gap de energia, a condutividade etc. tornam-se sintonizáveis por aplicação de uma voltagem externa ou por excitação ótica. Apresentamos as evidências experimentais da sintonizabilidade de algumas certas quantidades.

DEF/9:00/4A.F "CRESCEMENTO EPITAXIAL DA LIGA  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$  EM SUPERFÍCIES NÃO PLANARES". - Wilson Carvalho Jr. e José R. Caumo - CPqD-TELEBRÁS-11.085-Campinas-SP.

O desenvolvimento de técnicas de crescimento de camadas cristalinas sobre substratos não planares é muito importante para a fabricação de lasers tipo cama da enterrada.

No presente trabalho, mostraremos resultados preliminares na obtenção de estrutura enterrada tipo VSB (V-groove substrate buried). Serão discutidos os etapas químicas para formar o V no substrato e as técnicas de crescimento por epitaxia de fase líquida.

DEF/9:20/4A.F PUREZA DOS REAGENTES E CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS E ÓTICAS DE CAMADAS EPITAXIAIS III-V CRESCIDAS POR MOCVD. - Izaque A. Maia, Inês Joékes (Instituto de Química-UNICAMP), Aldionso M. Machado, Marco A. Sacilotti (CPqD-TELEBRÁS).

O MOCVD (Metal Organic Chemical Vapour Deposition) é uma técnica de crescimento epitaxial que consiste essencialmente da pirólise de organometálicos do grupo III (ou V) e hidretos do grupo V sobre um substrato aquecido. A pureza desses reagentes, no entanto, é uma séria limitação dessa e de outras técnicas similares, tais como o CBZ e o MOMBE.

A instabilidade dos organometálicos na presença de O<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O, a dificuldade de obtê-los e mantê-los puros durante a sua utilização e a necessidade de sofisticadas técnicas para a dosagem de impurezas ao nível de traços são dificuldades para o crescimento de ligas III-V de alta pureza.

Neste trabalho procuraremos correlacionar as purezas dos reagentes e das camadas epitaxiais utilizando dados obtidos do crescimento de GaAs num sistema MOCVD - Pressão atmosférica e caracterização elétrica e ótica com efeito hall, polaron e fotoluminescência.

DEF/9:40/4A.F "CRESCEMENTO EPITAXIAL DE  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  POR LPE" - P.J. Shieh - CPqD-TELEBRÁS - Campinas-SP.

Cristais de InGaAs são de interesse na sua aplicação em fotodetetores para sistemas de comunicações ópticas. Para isso os cristais precisam ter uma alta pureza (da ordem de 10<sup>15</sup> portadores por cm<sup>3</sup>). Através do método da Epitaxia por Fase líquida (LPE), estamos conseguindo obter camadas epitaxiais de InGaAs de ótima morfologia e concentração de portadores da ordem de 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>. As camadas são crescidas sobre substrato de InP na direção (100) com casaamento do parâmetro de rede (A<sub>a</sub>/a) em torno de 10<sup>-4</sup>. As mobilidades eletrônicas, medidas pela técnica de van der Pauw, são comparáveis aos melhores valores da literatura para a mesma faixa de concentração de portadores (o nosso melhor resultado até agora foi  $\mu(77K) = 40000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{s}^{-1}$  para  $n = 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ). A fim de melhorar a reprodutibilidade dos crescimentos e abalar mais ainda a concentração de portadores, estamos estudando o efeito de vários parâmetros de crescimento sobre a qualidade dos cristais.

**DEF/10:13/4A.F** CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE SILÍCIO UTILIZANDO MICROSCOPIA DE INFRAVERMELHO E TOPOGRAFIA DE RAIOS X. Victor Hugo Etgens (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP) e Irene Denicoló (CPqD- Telebrás).

No momento, o silício é um material amplamente utilizado na indústria microeletrônica e não é provável que seja em breve substituído. A observação de defeitos cristalinos torna-se mais difícil a medida em que se produzem cristais livres de macrodefeitos ("free deslocation"). No caso dos microdefeitos, apesar de serem amplamente estudados nos últimos anos, ainda não se tem uma teoria amplamente aceita sobre suas origens e consequências. As técnicas que usamos para a observação de microdefeitos formam a topografia de raios x e a microscopia de infravermelho. A visualização dos microdefeitos torna-se possível através da decoração do silício com cobre ou lítio. A decoração consiste na difusão de cobre ou lítio no silício em altas temperaturas; promove-se então um rápido abaixamento da temperatura da amostra, fazendo com que o cobre ou lítio cheguem a supersaturação e precipitem. A precipitação destes metais se dá preferencialmente nas regiões de defeitos. Isto gera o contraste eletrônico necessário para a observação dos microdefeitos na topografia e na microscopia de infravermelho. São analisados os resultados obtidos para amostras de silício de várias procedências, variando-se a temperatura de difusão, quantidade de material difundido e tipos de defeitos revelados. Faz-se uma comparação entre as técnicas de topografia de raios x e microscopia de infravermelho para o caso estudado. (CNPq - FINEP - TELEBRAS ).

**DEF/10:35/4A.F** CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS EXTENSOS DE SILÍCIO ATRAVÉS DE DIFRATOMETRIA GAMA. Gonçalves, O.D. (IF/UF RJ), Schneider, J. (HMI-Berlin), Graaf, H. (HMI-Berlin).

Utilizando-se o difratômetro de radiação gama do Instituto Hahn-Meitner de Berlin, e radiação de 0.0392 Å proveniente de uma fonte de Irídio de intensidade de 200 Ci, analisou-se uma série de monocristais de Si (1 cm de espessura, 10 cm de diâmetro) em diversos elementos de volume. Foi medida a potência de reflexão integrada variando-se a posição e a inclinação do cristal com relação à direção da radiação incidente. Foram também obtidas "rocking curves" para diferentes reflexões acessíveis, sendo possível uma comparação entre diferentes processos de crescimento dos cristais (cridados pela Wacker Chemitronic).

Atualmente estudamos a possibilidade de implantação de um sistema de difratometria gama semelhante no Instituto de Física da UF RJ.

**DEF/10:35/4A.F** VARIACAO DA FIGURA DE MÉRITO (Z) EM LIGAS MONOCRISTALINAS E SINTERIZADAS 80Si-20Ge - Odílio B.G. Assis, Luis V.A Scalvi e Bernhard J. Mokross - Inst. de Física e Química de São Carlos - USP.

As ligas Si-Ge são caracterizadas por sua baixa resistência elétrica, baixa condutividade térmica e alta estabilidade química e mecânica. Estas características associadas a elevada figura de mérito (Z) para geração de potência termoelétrica, fazem dessas ligas os materiais indicados à confecção de dispositivos geradores de termoelétricidade a temperaturas superiores a 1000°C.

Os cristais usualmente utilizados na confecção dos módulos são ligas monocrystalinas ligeiramente dopadas (Fósforo-n, Boro-p) em composições 20Ge-80Si. Embora atunemente tenha-se optado por materiais sinterizados (de mesma composição) como processo influente na melhora de Z (relação que envolve as características termoelétricas do material).

E apresentado a variação das propriedades relacionadas em Z com relação aos monocristais e ligas sinterizadas. (FAPESP).

**DEF/11:15/4A.F CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE LiNbO<sub>3</sub> E SUAS SOLUÇÕES SÓLIDAS ÓXIDAS.** Edson Salvador Octaviano e José Pedro Andreatta ( Instituto de Física e Química de São Carlos - USP ).

A matriz monocrystalina de LiNbO<sub>3</sub>, e suas soluções sólidas óxidas tem despertado crescente interesse devido a sua aplicação em diversas tecnologias como: lasers, detectores ópticos integrados, dispositivos eletrônicos, comunicações ópticas, memórias ópticas, etc. Deve-se ainda considerar que as soluções sólidas óxidas possuem a versatilidade da otimização de suas propriedades para aplicações específicas através do controle de sua composição.

O nosso trabalho teórico-experimental tem como base o crescimento de monocristais de LiNbO<sub>3</sub> puros e dopados (Cr<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Mg<sup>2+</sup> e outros óxidos), através do método de Czochralski (fusão), bem como a orientação dos domínios de dipolos ferroelétricos do LiNbO<sub>3</sub> durante o processo de crescimento através da aplicação de um campo elétrico, sendo que essa orientação de domínios de dipolos ferroelétricos é necessária devido a sua dependência com a qualidade ótica do cristal, de grande importância quando de sua aplicação em dispositivos.

A caracterização de suas propriedades, com ênfase na perfeição estrutural e na análise da orientação dos domínios de dipolos ferroelétricos é feita através de ataque químico (HCl:LiNbO<sub>3</sub> - 1:2) e microscopia e também RX. A análise da concentração de dopantes na matriz é feita por espectrofotometria de absorção atómica e os resultados encontrados nos permitem obter o coeficiente de segregação efetivo, fundamental para o planejamento de novos experimentos. (FAPESP, FINEP).

**DEF/11:35/4A.F CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS E POLICRISTAIS DE LiNbO<sub>3</sub>, DOPADOS COM CrO<sub>3</sub>.** Valmor Roberto Mastelaro, Irene Benicoli<sup>1</sup>, Yvonne Primeirano Mascarenhas e Maria Cristina Terrelle (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP São Carlos) ("CPqD-Telebras").

Os cristais de LiNbO<sub>3</sub> puros ou dopados tem despertado grande interesse de pesquisa devido à sua grande variedade de aplicações, tais como: acústica, ótica não linear, memórias ópticas e holografia.

Medimos por difração de Raios-X (método de Debye-Scherrer, tendo silício como padrão interno e refinamento por mínimos quadrados) a variação dos parâmetros da cela unitária hexagonal dos cristais de LiNbO<sub>3</sub>, puros ou dopados com CrO<sub>3</sub>, em função da concentração do dopante. Pretendemos através destes resultados propor quais os possíveis sitios ocupados pelos íons dopantes na estrutura do LiNbO<sub>3</sub>, (Li, Nb e vacâncias) e compará-los com aqueles obtidos por Takei (Mat. Res. Bull. vol. 17, 1982) para a sistema LiNbO<sub>3</sub>, dopado com Fe. Os resultados por nós obtidos até o momento indicam um comportamento diferente para o caso do Cr.

Paralelamente, usando amostras monocristalinas crescidas sob campo elétrico, utilizamos a técnica de RPE (Ressonância paramagnética eletrônica) a fim de determinar a valência e a simetria de grupo pontual do sitio ocupado pelo dopante. Os espectros de RPE de nossas amostras dopadas com CrO<sub>3</sub>, apresentam bandas mais largas do que as obtidas por Rexford (Journal of Chem. Phys., VOL 52, 1970), possivelmente devido ao fato das mesmas não serem monodomínios ferroelétricos. (CNPq - FAPESP - FINEP )

**DEF/11:55/4A.F CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE BaTiO<sub>3</sub>.** Ailton Abrahão Martin e José Pedro Andreatta. (Departamento de Física e Ciéncia dos Materiais do Instituto de Física e Química de São Carlos da Universidade de São Paulo).

Os monocristais de Titanato de Bário (BaTiO<sub>3</sub>), foram crescidos pelo método de T.S.S.C. (Top Seeded Solution Growth), no Departamento de Física e Ciéncia dos Materiais, partindo de uma composição não estequiométrica do sistema BaO - TiO<sub>2</sub> (67% mol TiO<sub>2</sub> e 33% mol BaO). Em alguns monocristais ocorreram o desenvolvimento de trincas macroscópicas em regiões isoladas e uma alteração de cor, devido a incorporação de impurezas constituída principalmente de íons de Fe de valência ainda não determinada. Entretanto os processos de caracterização estudados pelas técnicas de Difratograma de Raios X, Fotografias de Laue, Debye-Scherr, Análise Química por Espectroscopia de Absorção Atómica e Espectroscopia Ótica, mostram que os monocristais de BaTiO<sub>3</sub>, obtidos estão compatíveis com os encontrados na literatura. Algumas medidas iniciais da temperatura de transição de fase (ferroelétrica- Paraeletérica) mostram que aparentemente a temperatura de Curie não é alterada por estes impurezas, permanecendo em aproximadamente 130°C.

**DEF/8:00/5A.F** CARACTERIZAÇÃO DE UM CRISTAL LASER DE YLF<sup>(\*)</sup>. Marly Bueno de Camargo<sup>(\*)</sup>, Nelson Batista de Lima, Laércio Gomes e Spero Penha Horato (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/SP) Howard Joseph Guggenheim (Bell Telephone Laboratories).

O objetivo deste trabalho é a construção de um laser pulsado de YLF ( $\text{LiY}_{0.6}\text{Er}_{0.4}\text{F}_3$ ) onde o Er estando numa concentração de 40% não é mais o dopante da rede, mas faz parte dela. Obtemos com isto um cristal misto que é a principal novidade deste projeto, uma vez que até o presente não se utilizou concentrações de Er superiores a 10%. A emissão estimulada acima de 1,4  $\mu\text{m}$  é de interesse, pois o olho humano está menos sujeito a danos na retina, uma vez que a transmissividade do meio ocular fica muito reduzida. Por este motivo escolhemos a transição em 1,73  $\mu\text{m}$  para este estudo e também por que isto favorece aplicações futuras em sistemas de medição de distâncias. Foram feitas medidas de fluorescência de raios-X, obtendo-se a fórmula mínima para o material:  $\text{LiY}_{0.6}\text{Er}_{0.4}\text{F}_3$ . O número de átomos de Er foi estimado em  $4,62 \cdot 10^{21}$  átomos/ $\text{cm}^3$ . A densidade deste material é de 4,696 g/ $\text{cm}^3$ . As medidas dos parâmetros de rede foram feitas numa câmara de pó tipo Guinier, com padrão interno SiO. Obtivemos sub- $a$   $(5,161 \pm 0,010)$  Å,  $c = (10,720 \pm 0,027)$  Å e o volume da célula unitária é  $V_c = (285,581 \pm 1,139)$  Å<sup>3</sup>. Segundo a literatura, estes valores para o cristal puro de YLF são  $a = b = 5,168$  Å,  $c = 10,736$  Å,  $V_c = 286,739$  Å<sup>3</sup> e para uma dopagem de até 8% em Er são sub- $a$   $5,175$  Å,  $c = 10,740$  Å,  $V_c = 287,624$  Å<sup>3</sup>. Isto sugere que a maior concentração de Er conduz a uma contração da célula unitária resultando numa estrutura mais compactada. Medidas de absorção óptica mostraram que o espectro contínuo apresenta linhas finas, como é característico dos elementos de configuração 4f<sup>n</sup> devidas a uma interação elétron-fonon fraca. Medidas preliminares de emissão obtidas por uma excitação com um laser de argônio em multilâminas resultaram numa emissão integrada acima de 800 nm, de ordem de 8 vezes menor que a emissão do neodímio a 12 na matriz de YLF.

(\*) Desenvolvido com o apoio da FINEP.

(\*) Bolsista de pós-doutoramento, FAPESP.

**DEF/8:20/5A.F** CARACTERIZAÇÃO DO QUARTZO NATURAL E SINTÉTICO. Carlos K. Suzuki, Cristóvão R.L. Farias e Daniele C. A. Hummel. UNICAMP - Instituto de Física.

O quartzo natural apresenta uma complexa e fascinante gama de defeitos de crescimento, tais como, geminados, deslocações, "boundaries", inclusões sólidas e líquidas (gasosas), heterogeneidade na concentração de impurezas, etc. que dependem da geologia de formação e das condições de crescimento na natureza. Por exemplo, a distribuição de microcavidades ("bubbles") ocorre preferencialmente ao longo dos "boundaries" e "cracks", e a sua concentração está relacionada com outros tipos de defeitos estruturais.

Por outro lado, o quartzo sintético crescido em autoclaves pelo processo hidrotérmico depende basicamente de tres fatores: (1) a qualidade da semente; (2) a qualidade do nutriente (lascas); e (3) as condições de crescimento.

O estudo de caracterização realizado por topografia de raios-X de dupla reflexão em cristais naturais e sintéticos, levando em consideração o conhecimento prévio da jazida (quartzo natural) e o controle das tres condições básicas de crescimento hidrotérmico, foram correlacionadas com observações por microscopia ótica. Estes resultados revelam informações básicas sobre o mecanismo de crescimento natural e sintético. (FAPESP, JICA, ABC-XTAL).

**DEF/8:40/5A.F** DINÂMICA DA INTERFACE DE CRISTAIS EM CRESCIMENTO ESTUDADA POR MEIO DE TÉCNICAS DE ESPALHAMENTO DE LUZ - O.N. Mesquita, L.O. Ladeira e Ivair Gentijo - Departamento de Física - ICEx - UFGM - Belo Horizonte - MG

Espalhamento quase-elástico de luz é feito nas interfaces cristal-líquido e cristal-vapor de cristais durante crescimento num arranjo tipo Bridgman. Informações à nível das flutuações quase-microscópicas nas interfaces são obtidas e modelos físicos serão discutidos para explicar os resultados experimentais.

DEF/9:00/5A.F

TRANSIÇÃO DE FASE EM FILMES DE KPF<sub>6</sub>

T.Del Soldato, R.A.Nunes, L.C.Scavarda do Carmo - Depto. de Física e DCHM, PUC/RJ.

Filmes finos de KPF<sub>6</sub> foram crescidos por evaporação a vácuo com espessura de aproximadamente 0,3μm, sobre substratos de KBr. O processo de evaporação decompõe o cristal segundo a reação química KPF<sub>6</sub> + KF → PF<sub>5</sub>, dificultando a formação de filmes mais espessos.

A absorção ótica destes filmes no espectro infravermelho apresenta bandas nas regiões de 900 a 750 cm<sup>-1</sup> e de 580 a 550 cm<sup>-1</sup>, decorrentes dos modos vibracionais de estiramento e de flexão infravermelho ativos do íon molecular (PF<sub>5</sub>)<sup>-</sup>. A análise destas bandas de absorção a várias temperaturas entre 77K e temperatura ambiente permite observar a transição entre as duas fases estruturalmente distintas [redes fcc e sc] do cristal de KPF<sub>6</sub>.

A energia da banda de absorção mais distante (0,07 eV) é um valor compatível com resultados de medidas de detecção de luminescência de KPF<sub>6</sub> excitado por raios-X.

DEF/9:20/5A.F

FILMES DE MATERIAIS IÔNICO-MOLECULARES

Raul Almeida Nunes, Luiz Carlos Guedes Valente, Sidnei Paciornik, Teresa Del Soldato, João Carlos Cencio, Luiz Carlos Scavarda do Carmo

Dept. de Física e DCHM, PUC/RJ

Cristais de materiais iônico-moleculares podem ser produzidos facilmente por evaporação a vácuo. Halogenados alcalinos, um cianeto alcalino(KCN) e KPF<sub>6</sub>(fluoreto de fósforo e potássio) foram crescidos com espessuras na faixa de 0,3μ a 1,2μ em forma tanto cristalina quanto amorfa.

Esses materiais produzidos estão sendo caracterizados por diversas técnicas: difração de raios X, absorção ótica no infravermelho, índice de refração, características de centro de cor produzidos.

Pretende-se produzir diversos materiais, iônico-moleculares na forma de filmes finos e comparar suas propriedades com as dos cristais crescidos por métodos usuais.

DEF/9:40/5A.F

DEPENDÊNCIA DOS PARÂMETROS DE SÍNTSE NA CRYSTALINIDADE E NAS PROPRIEDADES DE MATERIAIS BIDIMENSIONAIS POLICRISTALINOS DERIVADOS DE ÁCIDOS FOSFOROSOS E Zr(IV). Oswaldo Luiz Alves, Francisco M.S. Garrido(GEQV, Instituto de Química, UNICAMP) e Lisandro P. Cardoso (Instituto de Física, UNICAMP).

As reações entre os ácidos H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> e H<sub>2</sub>PD<sub>3</sub>, respectivamente, ortofosfórico e fosforoso com Zr(IV), em solução aquosa, formam um gel branco muito denso. Este gel foi tratado em diferentes condições no sentido de se acompanhar a evolução da cristalinidade com relação aos seguintes parâmetros: tempo de tratamento hidrotérmico, tempo de agitação e ordem de adição dos reagentes. A dependência dos parâmetros foi acompanhada utilizando as técnicas de raios-X(método do pô) e espectroscopia de absorção no infravermelho.

Os dois sistemas mostraram uma forte dependência do aumento de cristalinidade com a concentração do ácido e do tempo de tratamento. No caso da família Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·nH<sub>2</sub>O podem ser obtidos materiais com boa cristalinidade mesmo sem a utilização de tratamentos hidrotérmicos.

Paradoxalmente, para certos sistemas considerados eminentemente amorfos(técnica de raios-X), através da técnica de espectroscopia no infravermelho pode ser observada uma ordem à curta distância, sugerindo que a formação da lamela polimérica (ZrO<sub>6</sub>) ocorre mesmo no material quasi-gel. O comportamento térmico e área superficial<sup>2</sup> (método B.E.T) apresentam grande variação em função dos parâmetros de síntese utilizados.

Estes materiais podem ser usados como precursores na síntese de várias famílias de condutores sólidos iônicos protónicos, alcalinos e mistos(CNPq, FINEP).

**DEF/10:15/5A.F** DIFUSÃO DE Fe NO ALUMINATO DE SÓDIO 8". J.M.Neto, H.S.Amorim, M. R. Amaral Jr., T.Abriggs e F. de S.Barros - Instituto de Física - UFRJ.

Ions de Fe trivalente podem ocupar dois tipos de sítios no superiónico Aluminato de Sódio 8": sítios Deaver-Ross (3k), na região de condução iônica e sítios Al(3), nos blocos spinéis, próximos à região de condução. A população relativa de ocupação destes sítios (sítio I e II, respectivamente) depende do tempo de annealing do material, e quando este tempo é acima de 10h (a 1200°C) pode mudar a temperaturas menores que a temperatura ambiente. É proposta uma difusão de ions Fe de sítios I para sítios II a temperaturas menores que a temperatura ambiente nos materiais submetidos a longo annealing.

Os materiais, com até 1% at./mol de Fe, são investigados através de luminescência deste ion.

**DEF/10:35/5A.F** PERDAS DIELETÉRICAS DE IONS OH<sup>-</sup> NOS HALETOS ALCALINOS. Laércio Gomes, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP

A presença de ions OH<sup>-</sup> substitucionais em matrizes sólidas de KCl, KB4 e RbB4 em concentrações entre  $10^{-3}$  e  $10^{-2}$  partes por mol, introduz picos de perdas dieletéricas (medida por técnica AC) localizados no intervalo de frequências entre 10 e  $10^5$  Hz na região de altas temperaturas entre 50K e 100K. Essa perda é atribuída a um possível mecanismo de reorientação clássica ( tipo Arrhenius ) de dipolos com energias de ativação  $E \sim 927\text{cm}^{-1}$  em KCl,  $E \sim 1201\text{cm}^{-1}$  em KB4 e  $E \sim 1089\text{cm}^{-1}$  em RbB4. Esses valores de E estão compatíveis com os valores das barreiras rotacionais (K) estimadas para a reorientação dipolar OH<sup>-</sup> nas várias redes estudadas ( $K \sim 640\text{cm}^{-1}$  em KCl).

A dependência linear da constante dieletérica imaginária integrada,  $A(E'')$ , com a concentração de OH<sup>-</sup> e também com  $T^{-1}$  sugere que o efeito observado seja produzido por dipolos elétricos isolados porém com magnitude p reduzida onde  $p = 0,4$  POh<sup>-</sup>.

**DEF/10:55/5A.F** TERMOLUMINESCÊNCIA INDUZIDA EM VIDROS ALUMINATOS DE CÁLCIO. Roberto Verzini (METAGAL Indústria e Comercio Ltda.) e Ana Regina Blak (Departamento de Física Nuclear do Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Para o estudo da termoluminescência (TL) induzida em vidros aluminatos de cálcio foram utilizadas amostras com a composição de 40,8 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 49,0 CaO, 6,1 SiO<sub>2</sub> e 4,1 MgO.

A curva de emissão TL das amostras apresenta um pico com máximo em temperatura em torno de 150°C. O decaimento térmico deste pico foi estudado para temperaturas entre 300 e 1200°C. Uma análise da cinética desse processo térmico revelou que não se tratava de primeira ou de segunda ordem. Foi utilizado também o método da "subida inicial", que permite a obtenção dos parâmetros: energia de ativação e fator de freqüência a partir do gráfico do logaritmo da corrente em função do inverso da temperatura. Da aplicação deste método constatou-se que a banda resulta de uma superposição de vários picos com uma distribuição quase contínua de níveis de energia das armadilhas. O estudo foi completado com a utilização de um terceiro método que relaciona a posição da temperatura do pico de emissão TL com o número inicial de portadores de carga armadilhados. (FINEP)

**DEF/11:15/SA.F** **CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS DE NEJiTÉ PARA DETETORES DE RADIAÇÃO.**  
Sonia Licia Balduchi e Spero Penha Horato (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Cristais de iodeto de sódio dopados com tálio são rotineiramente crescidos em alguns países e comercializados já forma de cintiladores (encapsulados) para detecção de radiação. O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um projeto para implantação de um método apropriado à obtenção de cristais de NeJiTé para posterior construção de detetores de radiação. O crescimento de monocrristais de NeJiTé (com concentrações apropriadas) apresenta dificuldades devido à alta pressão de vapor do tálio na fusão. Os resultados obtidos, até o presente, demonstraram que o puxamento Czochralski, muito utilizado no crescimento de baixos alcalinos em geral, resulta em baixas concentrações de tálio incorporada à rede, devido a características próprias do método (caminhos não selados). O método Bridgman, sendo pesquisado atualmente, apresenta dificuldades relativas à qualidade ótica do cristal obtido, entretanto apresenta-se ainda como uma solução viável.

**DEF/11:35/SA.F** **ESTRUTURA DE AEROGEIS DE SILICA.** D. dos Santos e M. Aegerter, Instituto de Física e Química de São Carlos, A. F. Craievich, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, T. Loure e J. Zarzycki, Université de Montpellier.

Aerogeis foram produzidos por secado hiperíctrico de geis úmidos obtidos a partir de soluções de TMOS-água-metanol. As estruturas destes materiais foram estudadas por espalhamento de raio X a baixos ângulos utilizando uma fonte sincrotron (LURE). Em aerogeis básicos e neutros foi observado que a dimensão fractal e o raio de giro aparente diminuem para concentração de TMOS crescente. Foram observados "cross-overs" nas curvas de espalhamento que indicam a presença de unidades estruturais de 13,5 Å (geis básicos), 8,5 Å (geis neutros) e 4,3 Å (geis ácidos). Os valores crescentes da área de interface, medidas por BET: 400m<sup>2</sup>/g (básicos), 700m<sup>2</sup>/g (neutros) e 850m<sup>2</sup>/g (ácidos), são coerentes com as conclusões expostas acima.

**DEF/11:55/SA.F** **COMPORTAMENTO TÉRMICO DO PERFIL DO BI IMPLANTADO EM SISTEMAS BI-CANADA.** C.A. Olivieri (DF/UFSCar), P.F.P. Fichtner (IF-UFRGS), J.P. Biersack (W.M.I.-Berlim) e D. Pinn (MPI-Berlim).

Realizamos implantações de íons de Bi em sistemas bi-camada constituídos por filmes de Al com 1550, 610 e 1000 Å de espessura, evaporados sobre substratos de Ti, KCl e V, respectivamente, tendo em vista dois objetivos mais imediatos: (i) Comparar as distribuições espaciais dos íons implantados com as previsões teóricas do programa de simulação Monte-Carlo (TRIM-Transport of Ions in Matter), desenvolvido por Biersack e Haggmark. (2) Analisar o comportamento dos íons implantados, após tratamentos térmicos isocronos. A técnica utilizada para analisar as distribuições foi a de Espectroscopia de Retrosspalhamento de Rutherford (RBS). Os resultados fornecidos pelo TRIM para os sistemas estudados estão totalmente de acordo com os dados obtidos experimentalmente, reproduzindo muito bem as descontinuidades que aparecem nas interfaces filme-substrato. Dos tratamentos térmicos pudemos concluir que: (i) As interfaces filme-substrato atuaram como barreiras para as difusões dos íons implantados. (ii) Na amostra de KCl, após cada tratamento térmico a partir de 500 °C, observamos deslocamentos do perfil do Bi em direção à superfície, os quais não foram observados no sistema Al/Ti. (iii) Ocorreu a precipitação da fase Al,Ti após o tratamento a 500 °C no sistema Al/V. (iv) O coeficiente de difusão do íon implantado no sistema Al/V pode ser escrito como  $D = 5 \times 10^{-5} \exp(-2.2 \text{ eV}/kT) \text{ cm}^2/\text{seg}$ .

**DEF/PAÍNEL**

### ESTUDO POR RESSONÂNCIA PARAMAGNETICA ELETRÔNICA DO BERILO INCOLOR

Ana Regina Blak (Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física da Universidade de São Paulo), Walter Magon Pontuschka e Sadao Isotani (Departamento de Física Experimental, Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

O espectro de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) do berilo natural incolor, irradiado com luz ultravioleta, apresenta o dupletô que caracteriza a presença de hidrogênio atômico  $H^0$  em  $H_1 = (0,2947 \pm 0,0003)T$  e em  $H_2 = (0,3450 \pm 0,0003)T$  medido na frequência de  $9,0326 \times 10^9$  Hz. Os valores  $g = 2,0054 \pm 0,0003$  e  $A = (0,930 \pm 0,002) \times 10^{-17}$  erg foram calculados com o uso da fórmula de Breit-Rabi com a inclusão do termo de Zeeman nuclear. Os centros de hidrogênio, estáveis à temperatura ambiente, não são observados quando o berilo é completamente desidratado. Assume-se que estes centros são produzidos a partir da fotodissociação da água que existe nos canais estruturais do berilo. Foi estudada a cinética do decaimento isotérmico do  $H^0$  em  $60^\circ$ ,  $80^\circ$ ,  $100^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $140^\circ$ ,  $160^\circ$  e  $180^\circ$ C respectivamente. São observados, nitidamente, dois processos distintos de decaimento: o primeiro é rápido, seguido de um segundo bem lento, de cinética complexa.

**DEF/PAÍNEL**

### EFEITO DAS RADIAÇÕES ULTRAVIOLETA E GAMA NA TERMOLUMINESCÊNCIA DO BERILO NATURAL, NAS CORES ROSA E INCOLOR (MORGANTITA E COSHENITA). Monilton Menezes (Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe) e Ana Regina Blak (Departamento de Física Nuclear do Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

No estudo da termoluminescência (TL) do berilo natural nas cores rosa e incolor foram utilizadas amostras provenientes de Minas Gerais e gentilmente cedidas por Halba Com. e Ind. de Pedras Preciosas S.A.. Estas amostras são ricas em elementos alcalinos e em manganês e apresentam pouca quantidade de ferro. As linhas características do  $Mn^{2+}$  e do  $Fe^{3+}$  são observadas nos espectros de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) do berilo. A irradiação com luz ultravioleta (UV) foi feita com lâmpada de Hg de 400W. A irradiação gama foi efetuada na fonte de  $^{137}Cs$  do Instituto de Biologia da USP. No berilo irradiado com UV a curva de emissão TL apresenta dois picos em  $170^\circ$ C e  $300^\circ$ C, respectivamente. Quando a luz UV incide nessas amostras, apenas um pico é observado em torno de  $130^\circ$ C. Foi feito um estudo do crescimento desses picos com a radiação. Verificou-se também a dependência da posição dos picos em temperatura com a taxa de aquecimento. Para restituir as propriedades originais das amostras foram efetuados tratamentos térmicos a  $400^\circ$ C por intervalos de tempo que variaram de 10 minutos a 1 hora. Finalmente, foi investigado o decaimento térmico dos picos TL para temperaturas entre  $50^\circ$ C e  $120^\circ$ C. (FINEP e CAPES)

**DEF/PAÍNEL**

### ESTUDO DO ENVELHECIMENTO E DA DENSIFICAÇÃO DE AEROGEIS DE SÍLICA POR TÉCNICA SAXS E BET. D.J. dos Santos, M.A. Asquerter\*, A.F. Craievich\*, T. Loura e J. Zarzycki\*\*.

\* Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cr. Postal 369, 13560 São Carlos, SP; \*\* Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro e Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, Campinas, SP; \*\*\* Laboratory of Science of Vitreous Materials, L.A. 1119 University of Montpellier, 34060 Montpellier, França.

Aerogéis de sílica foram preparados por secagem hipercrítica a partir da hidrólise de solução básica e ácida de  $TiO_2$  dissolvida em metanol e foram estudados por técnicas SAXS e BET. Durante o envelhecimento dos gelos o tamanho dos poros diminui e a dimensionalidade fractal da estrutura aumenta confirmando a existência de migração atômica local ocorrida na fase líquida. Durante os tratamentos térmicos (até  $810^\circ$ C) o tamanho dos poros diminui progressivamente e é acompanhado por um alisamento da interface poro-matriz. À mais alta temperatura (até  $1085^\circ$ ) o número de poros diminui, mas os seus tamanhos aumentam, conduzindo ao aumento progressivo da densidade do aerogel por um mecanismo de Ostwald. Pesquisa subvencionada pela FINEP, CNPq e FAPESP.

**DEF/PAINEL** ESTUDO DA VISCOSIDADE DURANTE A TRANSFORMAÇÃO SOL-GEL DE SÍLICA. *Osamu Kinosuhi Filho e Michel André Agresta*. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

A viscosidade do sol de sílica, preparado a partir de solução de TMOS/Metanol/água, foi determinada durante a transformação sol-gel em função da temperatura e do tempo usando um viscosímetro de rotação. A viscosidade cresce progressivamente com o tempo e aumenta drasticamente perto do ponto de gelificação. O sol se apresenta inicialmente como um líquido newtoniano; ele se transforma progressivamente num líquido viscoelástico para finalmente tornar-se um sólido viscoelástico (sólido de Bingham). Descreveremos o método usado, assim como as propriedades físicas particulares resultantes do processo de transformação sol-gel. Pesquisa subvencionada pelo CNPq, FAPESP e FINEP.

**DEF/PAINEL** RESPOSTA DIELETÉTRICA DE AEROGEIS DE SÍLICA. *Adão Antônio da Silva e Michel André Agresta*. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

Aerogéis de sílica foram preparados por secagem hipercrítica de geis a partir da hidrólise de soluções TMOS - Metanol. A resposta dieletétrica desses materiais altamente porosos foi estudada entre 1.7 e 300 K e freqüências  $10^{-3}$  a  $10^5$  Hz. Para  $T > 100$  K a constante dieletétrica  $\epsilon'$  é constante mas muito menor que aquela de sílica vítreas. Uma diminuição rápida de  $\epsilon'$  é observada em torno de 35 K, acompanhada de um grande pico de perda dieletétrica ( $\tan \delta$ ) indicando a presença de grande densidade de defeitos. Apresentaremos também os resultados obtidos para aerogéis tratados termicamente a 1085°C durante o processo de densificação (transformação aerogel - sílica vítreas). Pesquisa subvencionada pela FAPESP, CNPq e FINEP.

**DEF/PAINEL** PRODUÇÃO DE FILMES DE CIANETO DE POTÁSSIO, AMORFOS E CRYSTALINOS. *L.C. Guedes Valente<sup>a</sup>, S. Pacionik, R.A. Nunes e L.C. Scavarda do Carmo<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Depto. de Física e Depto. de Ciência dos Materiais e Metalurgia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Filmes de KCN com aproximadamente 1 μm de espessura foram crescidos pela técnica de evaporação em alto vácuo ( $10^{-6}$  torr), sobre substratos amorfos ( $\text{CaF}_2$  e  $\text{SiO}_2$ ) e cristalinos (KBr e KCl) a temperatura ambiente e a 500K. Os filmes resultantes foram analisados pela técnica de difração de raios-X visando determinar a natureza amorfá ou cristalina. Para observar a existéncia e, em caso afirmativo, determinar a temperatura das transições de fase (estrutural e antiferroelétrica) conhecidas no cristal de KCN, foram feitas medidas de absorção ótica na região do infravermelho com as quais se determinava a largura de linha do modo de estiramento do CN (extremamente sensível às transições de fase). Foi determinado que filmes em substratos amorfos são cristalinos quando o substrato é aquecido e amorfos quando este é mantido a temperatura ambiente. Filmes crescidos em substratos cristalinos (KCl e KBr) não sempre cristalinos. Todos os filmes cristalinos apresentam ambas as transições de fase nas mesmas temperaturas que o cristal.

\* Também do Depto. de Eng. de Telecomunicações, Universidade Federal Fluminense

**DEF/PAINEL**

"CRESCIMENTO EPITAXIAL DE InGaAsP COM BAIXA SATURAÇÃO: POSSÍVEL APLICAÇÃO EM POÇOS QUÂNTICOS". - José Roberto Caumo e Wilson Carvalho Junior - CPqD-TELEBRAS - 13.085 - Campinas, SP.

Camadas de InGaAsP crescidas por epitaxia de fase líquida com baixa saturação da solução, apresentam uma taxa de deposição bastante baixa, sendo possível o crescimento de camadas finas. Serão apresentados os resultados de crescimento da liga quaternária InGaAsP ( $\lambda = 1.3\mu m$ ) usando solução de crescimento com supersaturação de  $\Delta T = 0,5$  C. Serão discutidas as possibilidades de crescimento de poços quânticos utilizando esta técnica.

**DEF/PAINEL**

**CRESCIMENTO DE HETEROESTRUTURA DE GaAs/GaAlAs POR MOCVD À PRESSÃO ATMOSFÉRICA.** - Aldionso M. Machado, Marco A. Sacilotti e Izaque A. Maia (CPqD-TELEBRAS).

Em um reator horizontal à pressão atmosférica, estamos crescendo sobre substratos de GaAs com orientação (100), camadas epitaxiais de GaAs e GaAlAs com o objetivo de obter heteroestruturas para a fabricação de laser e outros dispositivos. As camadas já crescidas apresentam morfologia, propriedades ópticas e elétricas iguais aos valores médios disponíveis na literatura. Estamos levantando as curvas de taxa de crescimento e propriedades elétricas das camadas, em função dos diversos parâmetros de crescimento.

**DEF/PAINEL**

**EXPERIMENTOS DE CO-RECOZIMENTO DE SUBSTRATOS DE GaAs e InP EM ATMOSFERAS MOVPE DE CRESCIMENTOS DE CRISTAIS.** - Marco A. Sacilotti (CPqD-TELEBRAS), Sandra G.C. Castro (I.F. Unicamp), Remo A. Masut (NRC-Canadá).

GaAs e InP são materiais básicos utilizados como substratos onde são crescidas camadas epitaxiais, contendo elementos das colunas III e V. Entre os tipos de crescimentos epitaxiais, encontra-se o MOVPE (Metal-organic vapour phase epitaxy), o qual utiliza hidretos como H<sub>2</sub>, AsH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, etc. A interação destes hidretos com substratos e a troca de espécies (evaporadoras destes) entre estes proporcionam informações valiosas sobre espécies presentes durante crescimento epitaxial MOVPE. Neste trabalho pretendemos apresentar resultados de co-recozimento destes dois tipos de substratos, bem como a caracterização das superfícies destes após o tratamento térmico. Com estes resultados nos é possível apresentar modelo preliminar de crescimento MOVPE.

**DEF/PAINEL****COMPARAÇÃO ENTRE AS TEORIAS CINÉMÁTICA E DINÂMICA NA DESCRIÇÃO DA POTÊNCIA DE REFLEXÃO INTEGRADA DE MONOCRISTALIS DE SILÍCIO COM ALTO GRAU DE PERFEIÇÃO.**  
**Gonçalves, O.D. (IP/UFSC), Scheider, J. (MPI-Berlin), Graaf, H. (MPI-Berlin)**

Através da difratometria gama com radiação de 0.0392 Å, realizou-se no MPI de Berlin, uma sistemática de medidas em monocristais de silício com alto grau de perfeição, com o objetivo de se estudar a potência de reflexão integrada. Variando-se a espessura do cristal entre 1 e 4 cm esses dados foram comparados com resultados de teorias recentes utilizando-se o enfoque dinâmico (KATO) e também cinemático (DARWIN). Os resultados apontam a possibilidade de existência de clusters de oxigênio que seriam responsáveis por um espalhamento difuso não descrito pelas teorias consideradas.

**DEF/PAINEL****ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA APLICADA A MATERIAIS TRANSPARENTES.**

A.C.Bento, H.Vargas (Instituto de Física - UNICAMP - 13.081-Campinas,SP), H.H.F. d'Aguiar Neto ( Instituto de Física - UFBA. - 40.000-Salvador-BA ), L.C.M.Miranda (Lab.Associado de Sensores e Materiais-INPE/MCT - São José dos Campos, SP.)

O método fotoacústico é aplicado para algumas amostras de quartzo e vidros. A quantidade física usada como parâmetro térmico monitorado, é a difusividade térmica, a qual é determinada através de dados da fase fotoacústica. Em baixas frequências de modulação, a difusividade térmica é obtida através da medida da diferença de fase entre as iluminações frontal e traseira. Em altas frequências de modulação, a difusividade térmica é obtida através da dependência de dados da fase devido à iluminação frontal.

Amostras de vidros dopados com cobalto, em várias concentrações, estão sendo estudadas por este método. Espera-se obter um meio, simples e direto, para monitorar os efeitos do dopante, através de mudanças na difusividade térmica do material.

**DEF/PAINEL****CRESCIMENTO NA DIREÇÃO (420) E CARACTERIZAÇÃO DE UM CRISTAL DE LiF PARA EMPREGO EM ANÁLISE POR FRX.** Mirian Aparecida Gonçalves, Nelson Batista de Lima, Vera Lúcia Bibelot Salvador e Espero Penha Morato (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

A partir de uma semente cortada e orientada na direção (420) foi crescido um cristal de Fluoreto de Lítio (LiF) para ser utilizado como um cristal analisador para um espectrômetro de FRX.

A semente na forma prismática de base quadrada foi extraída por corte com serra de fio a partir de um bloco monocristalino orientado por difração de raio-X em um goniômetro de quatro eixos. Após crescido o cristal teve sua orientação verificada com o emprego do mesmo método. Lâminas com dimensões da ordem de 80 X 25 X 3mm<sup>3</sup> foram cortadas, polidas e posicionadas em um goniômetro do equipamento de FRX. O cristal de LiF com distância interplanar 2d=1.8010 Å da direção (420) aumenta sensivelmente a resolução na determinação de terras raras aumentando-se assim a precisão analítica do equipamento.

**DEF/PAINEL**

THE "FRINGE FUNCTION" METHOD TO MEASURE THE LATTICE PARAMETER OF AN EPITAXIAL THIN FILM. By S.Caticha Ellis, Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, C.P. 6165, 13070, Campinas, S.P., Brazil.

The measurement of the change  $\Delta a$  in the lattice parameter of a thin epitaxial film ( $f$ ) with respect to that of the bulk ( $b$ ) material depends on the small difference  $\Delta\theta_b - \theta_f$ , in Bragg angles for the same reflection in both samples. Since  $\Delta\theta$ , when obtained from the direct measurement of  $\theta_f$  and  $\theta_b$ , is likely to have a high relative error, the results generally obtained for  $\Delta a$  are relatively poor. A new, indirect, method to obtain accurate values has now been developed. The profile of a well annealed gold plate taken under exactly the same experimental conditions than those used to measure the profile of an epitaxial film of gold evaporated onto a freshly cleaved NaCl (001) plane, is used, as usual, to deconvolute the latter from the instrumental factors, thus obtaining the intrinsic profile of the film. This result approached quite well the theoretically expected shape  $A \sin^2(t/t_0)$ . To explain small but systematic departures from the theoretical curve, the Fourier transform of the experimental curve, was calculated. The agreement with the known "triangular" shape of the theoretical transform was quite good except for a modulation superimposed on the straight lines. This modulation is due to the fact that the maxima are separated in reciprocal space by a distance  $c$ , which is simply related to  $\Delta a$ . It is proved that the transform should be modulated by  $\exp(-2\pi k c)$  ( $k$  is the variable of the transform). The period  $1/c$  is then easily obtained. In the sample analysed,  $c=1/\Delta a = 27$  (units of  $k$ ) was found, which corresponds to a change  $\Delta a/a = 1.2\%$  or  $\Delta a = 0.05 \text{ \AA}^2$  with an error of about 4%.

**DEF/PAINEL**

## TEORIA DE DESLOCAÇÕES PARA A TRANSIÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO

A. Ferraz

Dept<sup>o</sup> de Física da UnB

A fusão de um cristal pode ser descrita em termos de uma geração espontânea de defeitos estruturais na rede periódica. Acreditamos que as deslocações têm uma atuação destacada na fusão de um metal.

Usando um modelo de campos para um gás de deslocações, desenvolvido anteriormente, nós agora calculamos a taxa de decaimento de um estado, onde deslocações prismáticas proliferam livremente, para o estado líquido.

**DEF/PAINEL**

SIMULAÇÃO MONTE CARLO DA TRANSIÇÃO DE RUGOSIDADE DE XENÔNIO ADSORVIDO EM PÁLADIO (H. A. A. da Silva, A. Caliri, E. J. Mokross, IFQSC, São Carlos, SP).

A transição de rugosidade durante a adsorção do Xe em Pd foi estudada experimentalmente por Miranda et al. (J. Chem. Phys., 80, 2931 (1984)) e teoricamente usando a aproximação de Bethe-Peierls por Cobrera et al. (Physica, 127B, 175 (1984)). Apresentaremos estudos em desenvolvimento de tal transição através do método Monte Carlo. (FAPESP, CNPq, FINEP, FIPEC).

**DEF/PAINEL**

A.J.P. Braga, R.T. Neuenchwander, F. Decker, C.L. César e A.F.S. Penna (IFGW - UNICAMP); J. Mendes Filho e A.R. Martins (U.F.Ce) e A.C. Oliveira (UFSCAr)

#### MEDIDAS FOTOTÉRMICAS

Medimos a difusividade térmica de vários materiais usando um sistema Fotoacústico com temperatura controlada, bombando por um laser de Ar<sup>+</sup>, através da técnica de diferença de fase. Também usamos a técnica de "Beam Deflection" em um sistema eletróquímico, onde o gradiente no índice de refração será devido ao gradiente na concentração dos íons em lugar do gradiente térmico nos métodos convencionais, para mostrar as possibilidades que este método oferece na obtenção de vários parâmetros.

**DEF/PAINEL**

#### TITÂNIO INTERSTICIAL EM SILÍCIO

George Balster Martins e Gaston Eduardo Barbosa.

Departamento de Eletrônica Quantica (Instituto de Física da UNICAMP).

Estamos calculando Ti intersticial em Silício, usando o método tight-binding semi-empírico e o método da Função de Green. Os elementos da matriz de acoplamento do cristal puro com a impureza, bem como as auto-energias dos orbitais "d" da impureza são calculados usando os parâmetros de Harrison (d<sup>-1</sup>). Estamos comparando com cálculos "ab initio" (ASW) usando função de Green não auto-consistente.

**FÍSICA ESTATÍSTICA E FENÔMENOS CRÍTICOS**

**Coord.: - Jürgen F. Stilck (IFUSP)**

**EST/8:00/4A.F** SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE SCHRODINGER UNIDIMENSIONAL. Rodolfo Lagos Monaco e Guillermo Cabrera Oyerzún, Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, S.P.

O trabalho estuda um novo método de iteração da matriz de transmissão. A finalidade desta é obter uma representação integral (de Riemann) para esta iteração, fornecendo-nos esta uma solução analítica, suscetível a ser analisada rapidamente, para qualquer potencial arbitrário. Especial atenção se dá aos potenciais racionais que apresentam soluções algébricas.

**EST/8:20/4A.F** EXCITAÇÕES NÃO LINEARES EM SISTEMAS MAGNÉTICOS DESORDENADOS

C.E. Cordeiro, Instituto de Física - UFF

Investigamos a existência de ondas solitárias em uma cadeia linear magnética desordenada. Trabalhamos diretamente com os operadores de Spin, analisando a equação de evolução desses operadores na representação de spin-coerente de Radcliffe. A estabilidade da solução desta equação na presença de um campo magnético externo é estudada.

**EST/8:40/4A.F**

CONTRIBUIÇÃO DE BREATHERS PARA O FATOR DE ESTRUTURA DINÂMICA DE SISTEMAS

MAGNÉTICOS QUASI-UNIDIMENSIONAIS - S.V. Costa e A.S.T. Pires

Departamento de Física - Universidade Federal de Minas Gerais

A contribuição de breathers sine-Gordon para o fator de estrutura dinâmico,  $S(Q,\omega)$  é calculada nos casos ferro anti-ferromagnético. O resultado ferro é comparado com dados experimentais.

**EST/9:00/4A.F PROPAGAÇÃO DE UM DEFEITO NO MODELO DE ISING A TRÊS DIMENSÕES**

Urbel Medeiros da Souza Costa - Univ.Fed.da Alagoas

Nós estudamos, utilizando o método de Monte Carlo, a evolução temporal de duas configurações tridimensionais de Ising que diferem apenas pelo spin central. Monitorando a propagação do defeito, observamos uma transição de fase para um valor da temperatura em concordância com a temperatura crítica de percolação de sítios com correlação de Ising.

**EST/9:20/4A.F TWO-DIMENSIONAL DIPOLAR SYSTEM. A MOLECULAR DYNAMICS STUDY - T.M.M. Horras<sup>a</sup>, R. Iebo e O. Hipólito - IFQSC-USP**

We consider a molecular dynamics simulation of a 2-dimension dipolar system under periodic-boundary condition. The dipoles are made up of 2 charged particles +e and -e, with same mass subjected to a fixed distance constrain equation; individual charges interact via the logarithmic and a short range repulsive potential. The dynamic dielectric constant  $\epsilon^*$  will be study as a function of temperature and dipole moment of the system.

(+) FAPESP

**EST/9:40/4A.F BIOGÊNESE: UMA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.** Hans J. Herrmann<sup>a</sup> e Constantino Tsallis (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-Rio de Janeiro). O crescimento, a partir de oligômeros, de polímeros codificados e autoreplicáveis foi uma etapa crucial da Biogênese<sup>[1]</sup>, tal como entendida atualmente. Ao longo de linhas recentemente propostas<sup>[2]</sup>, simulamos no computador uma "sopa primordial" simplificada para estudar a citada etapa. As moléculas (constituídas por adenina, timina, citosina e guanina) são supostas lineares; sua difusão é suposta bidimensional anisotrópica. Observamos, em nível microscópico, diversidade e seleção de tipo darwiniano no crescimento, que de fato acontece. A influência sobre o comprimento médio de diversos parâmetros (condições iniciais, parâmetros de difusão, probabilidades de ligações auto-catalizadoras A-T e CG, tempo) é exibida.

<sup>a</sup>Endereço permanente: Service de Physique Théorique, CEA-Saclay-91190 Gif sur Yvette - France

[1] C. Tsallis and R. Ferreira, in "Statistical Physics", ed. H.E.Stanley, 336 (1986) North-Holland (*Physica A* 140).

**EST/10:15/4A.F** DIAGRAMAS DE FASE EM UM MEIO SEMI-INFINITO COM CAMPO TRANSVERSO E AMORFISSAÇÃO NA SUPERFÍCIE\*. I.Kaneyoshi - University of Nagoya, Departement of Physics, Nagoya, Japan; and E.F. Sarmiento - Universidade Federal de Alegoas, Departamento de Física, Macaé, Brasil.

Diagramas de fase em um meio semi-infinito (Ising) com campo transverso e amorfização na superfície são estudados através de uma teoria de campo efetivo. É mostrado que quando o campo transverso  $J_b$  aumenta de zero,  $T_c^b$  cai de seu valor no modelo de Ising e atinge zero no valor crítico  $J_{sc}^b \approx 2.35 J_b$ , e para  $J_b > J_{sc}^b$  apenas uma transição de fase superficial é possível dependendo dos valores de  $J_b$  e  $J_a$ . Entretanto, para  $J_b < J_{sc}^b$  o sistema ordena na superfície antes do volume para valores  $J_a$  maior que um certo valor crítico  $J_{sc}$ , e diminuindo a temperatura o sistema apresenta respectivamente duas transições de fases, a de superfície e a de volume. Para este caso e fixado um valor para  $J_b$ , é mostrado que o efeito da amorfização na superfície é aumentar o valor de  $J_{sc}$  e diminuir a região de superfície ferromagnética. O fenômeno de reentrância é possível na superfície de um meio semi-infinito com campo transverso e amorfização na superfície, quando  $J_a$  torna-se um tanto maior que  $J_b$  e  $J_a$  (interação entre spins na superfície e seus vizinhos próximos na primeira camada) é tomado como um valor muito menor que  $J_b$ .

\* Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq e FINEP

**EST/10:35/4A.F**

PHASE DIAGRAM OF THE RANDOM-FIELD ISING MODEL WITH A TRIMODAL DISTRIBUTION  
Rafael M.Sebastião and V.K.Sakemba . Departamento de Física, UFSC

The random-field Ising model, with a trimodal distribution (sum of three g functions), is studied within the mean-field approximation. The averaged free energy and order parameter are analyzed in detail, numerically and through the Landau expansion, to construct the complete phase diagram in the parameter space of the system. A line of tricritical points, ending at a vestigial tricritical point, is obtained, a result also suggested recently by Mattis. Some new features of the phase diagram are also reported.

**EST/10:55/4A.F** MODELO DE ISING COM DILUIÇÃO CORRELACIONADA NA REDE DE BETHE-FASE VIDRO DE SPIN  
Jerônimo Borges da Silva, Sergio Coutinho e Francisco G. Brady Moreira. Departamento de Física - UFPE.

A temperatura crítica da fase vidro-de-spin do modelo de Ising com diluição aleatória correlacionada entre sítios e ligações foi estudada na rede de Bethe com número de coordenação arbitrário. Neste modelo, o valor e o sinal da constante de acoplamento da interação de intercâmbio entre dois átomos magnéticos estão correlacionados com a ocupação dos sítios vizinhos, desta ligação, por átomos magnéticos. Para uma dada concentração de átomos magnéticos, o sistema pode exibir efeitos de frustração devido à distribuição mista aleatória de ligações ferro e anti-ferromagnéticas com várias constantes de acoplamento. A linha crítica da fase vidro-de-spin, no diagrama temperatura crítica versus concentração ( $T_{c,sp}$ ), foi obtida exatamente e estudada, para vários valores do parâmetro de competição e do número de coordenação da rede.

EST/11:15/4A.F

ESPESSURA CRÍTICA DE CAMADAS EPITAXIAIS. Enzo Granato, MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, CP: 515, 12201 - SJCampos, SP, Brasil; J.M.Kosterlitz e S.C.Ting, Brown University, Providence, RI 02912, USA.

Apresenta-se uma teoria de estabilidade de camadas epitaxiais crescidas em substrato com parâmetro de rede diferente. Elasticidade de meios continuos é usada para cada camada mas o acoplamento entre as camadas é tratado de forma discreta. Apresenta-se também um cálculo variacional que possui boa concordância com os cálculos exatos. A principal vantagem de nosso método é o de permitir a análise da estabilidade de configurações arbitrárias de super-redes.

EST/11:35/4A.F

ESTUDO DA CINÉTICA DE ORDENAMENTO EM  $SbCl_5$ -GICs e  $AlCl_3$ -GICs ATRAVÉS DE RFE. S.Bolla, L.C.Walmley e C.Rettori\* (Instituto de Física da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP).

Experimentos de ressonância paramagnética eletrônica permitem-nos estudar a cinética de ordenamento numa transição de fase ordem-desordem, quasi-bidimensional, observada a temperatura  $T = (210 \pm 2)K$  em grafite intercalado com  $SbCl_5$ , estágio 4 e  $T = (168 \pm 2)K$  em grafite intercalado com  $AlCl_3$ , estágio 7. Um resfriamento rápido à partir da fase desordenada ( $T \gg T_c$ ) revela um aumento da largura de linha em função do tempo cujo comportamento é proporcional a  $(-t^{\alpha})$ . Nos atribuímos essa variação temporal da largura de linha ao crescimento no tempo do tamanho médio de domínios de uma super-rede fracamente incomensurável. O ajuste dos dados experimentais fornece  $\alpha=0.48$  para  $T < T_c$  e  $\alpha=0.55$  para  $T > T_c$  no caso do  $SbCl_5$ -GICs, estágio 4 e  $\alpha=0.42$  para  $T < T_c$  em  $AlCl_3$ -GICs, estágio 7. Os expoentes concordam com os valores obtidos por simulação Monte Carlo para crescimento de domínios de uma super-rede degenerada. Observamos uma cinética muito rápida para  $T > T_c$  em  $SbCl_5$  que pode indicar a presença de um fenômeno crítico. Cinéticas mais lentas são observadas após um tempo de aproximadamente 40 minutos e a temperaturas mais baixas ( $T < T_c$ ). Os resultados indicam que o sistema está num estado congelado meta-estável.

\* Suporte Financeiro: FAPESP e CNPq

EST/11:35/4B.F

SUPER-REDES MAGNÉTICAS: PROPRIEDADES ESTÁTICAS

Eduardo de Campos Valadares - Deptº de Física, Universidade Federal de Minas Gerais - C.P. 702 - 30.161 - Belo Horizonte, Minas Gerais

Considera-se um modelo simples para uma super-rede magnética, consistindo de interfaces periódicas descritas pelo modelo de Heisenberg anisotrópico spin-1/2, intercaladas por um meio estratificado de Ising spin-1/2. Diagramas de fase e diferentes perfis de magnetização determinados pelos parâmetros do modelo são discutidos através de um formalismo variacional, reobtendo-se os resultados usuais de campo médio no limite de uma única interface.

EST/8:00/5A.F

ELETROS QUASE-BIDIMENSIONAL: EFEITOS DA LARGURA FINITA DA CAMADA ELETRÔNICA

JOSE PEDRO RINO e NELSON STUDART - UNIVERSIDADE FEDERAL de SÃO CARLOS - UFSCar

É sabido que elétrons adsorvidos em um dielétrico podem permanecer ligados à superfície na direção perpendicular a este, formando um estado hidrogênico discreto, e movendose relativamente livres na direção paralela à superfície do dielétrico comportando-se como um gás bi-dimensional clássico.

Estes elétrons ao serem depositados sobre o dielétrico não formam na verdade um sistema bi-dimensional no sentido matemático, mas existe uma espessura finita da camada eletrônica.

Nossa objetivo será o de estudarmos o efeito da largura finita da camada eletrônica na energia do estado fundamental e fator da estrutura estatística, através de aproximação da Campo Auto Consistente.

EST/8:20/5A.F

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE UM GÁS DE BOSE IDEAL ULTRARELATIVÍSTICO EM PARAESTATÍSTICA

Melquisedech S. Silva e Hidembergue O. Prota-U.Amazonas  
Sylvio Goulart Rosa Jr. - IFQSC

Discutimos as propriedades termodinâmicas de um gás de Bose ideal ultrarelativístico paraestatístico em  $d$  dimensões, assumindo que para temperaturas  $k_B T \gg mc^2$  torna-se importante levar em consideração a produção de pares partículas-antipartículas, onde o número de partículas ( $N$ ) não se conserva, porém, a diferença entre este e o número de antipartículas ( $\bar{N}$ ),  $N - \bar{N}$ , é conservada.

EST/8:40/5A.F

PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE RESISTORES FRACTAIS. S.V. Cavalcante, M.A.F. Gomes e G.L. Vasconcelos (Departamento de Física, UFF).

Fractais são agora um tópico de vasto interesse<sup>1</sup>. Recentemente estudamos um novo tipo de fractal<sup>2</sup> que é o análogo da dimensão topológica  $d_T = 2$  do SAW (Self-Avoiding Random Walk), cujo  $d_T = 1$ . Cálculos Monte Carlo para esta classe de sistemas foram realizados por Kantor e colaboradores no último ano<sup>3</sup>. Aqui estamos interessados nas propriedades dinâmicas e de equilíbrio deste tipo de fractal. Tais propriedades foram estudadas<sup>4</sup> através de medidas da resistência elétrica desses objetos, construídos tanto com materiais orgânicos quanto metálicos. Enfase particular é dada às flutuações da resistência elétrica desses resistores. A utilização de componentes elétricos diversos e circuitos com o mesmo tipo de geometria fractal discutida na referência 2 está sendo pesquisada pelos autores.

<sup>1</sup> B.B. Mandelbrot, "The Fractal Geometry of Nature" (Freeman, 1983).

<sup>2</sup> M.A.F. Gomes, J. Phys. A : Math & Gen. em impressão (1987)

<sup>3</sup> Y. Kantor, M.Kardar e D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 57, 791 (1986)

<sup>4</sup> S.V. Cavalcante, M.A.F. Gomes e G.L. Vasconcelos, J. Phys. A : Math & Gen. a ser submetido.

EST/9:00/SA.F

UM MODELO ELATAMENTE SOLÜVEL NA REDE QUADRADA DIRIGIDA P. H. de Oliveira e S. H. de Oliveira (UFF Niterói RJ)

Nossa rede direcionada, as ligações transmitem informação apenas no sentido dos eixos correspondentes. Uma informação que parte da origem poderá ficar ilhada numa região finita se  $\alpha < \alpha_c$ , ou se difundir indefinidamente se  $\alpha > \alpha_c$  ( $\alpha$  é a concentração de ligações presentes). As correlações na direção diagonal apresentam um expoente crítico distinto daquele correspondente a outras direções a partir da mesma origem. Também as correlações transversais apresentam um terceiro expoente. Define-se um modelo com estas características e pretende-se discutir suas implicações e a relação com o problema da percolação.

EST/9:20/SA.F ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM SEMICONDUTORES FOTO-EXCITADOS. Tânia Tomé. Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Analisamos a formação de estruturas dissipativas em matéria condensada através da metodologia mecanico-estatística. Para tanto recorremos ao método do operador estatístico de não-equilíbrio de Zubarev. Esta formulação fornece equações de transporte não-lineares que prescindem de quaisquer coeficientes fenomenológicos. A noiosa análise foi elaborada para os plasmas em semicondutores altamente foto-excitados. Demonstramos que a partir de um nível crítico de excitação estes sistemas podem sofrer transição de um regime desordenado para um regime macroscopicamente ordenado. Esse último é caracterizado por estruturas espacialmente auto-ordenadas na forma de ondas de densidade de cargas estacionárias.

EST/9:40/SA.F

A Entropia e o Fluxo da Entropia para um Gás Diatômico

G. M. Kremer - Departamento de Física - UFRJ

O objetivo deste trabalho é a obtenção da entropia e do fluxo da entropia para o caso de um gás, cujas moléculas possuem energia vibracional e que se encontra em um estado fora do equilíbrio.

As expressões, obtidas através da teoria estatística e da teoria das flutuações, contém termos até a segunda ordem nas variáveis: energia específica vibracional, tensor pressão, fluxo de calor translacional e fluxo de calor vibracional.

Apoio CNPq.

**EST/10:15/5A.F** FUNÇÃO DE PARTIÇÃO DO MODELO DE POTTS COM INTERAÇÃO MULTISPIN NA REDE TRIANGULAR. Roberto Nicolau.Onody (IFQSC.USP)

O modelo de Potts com interação de 2 e 3 spins na rede triangular é mapeado num modelo de seis vértices. Esse modelo de vértices viola a invariância Z, não permitindo, portanto, a obtenção exata da função de partição via equações de Yang-Baxter.

**EST/10:35/5A.F** TRANSIÇÃO DE ORDEM CONTÍNUA DO MODELO DE POTTS NA ÁRVORE DE CAYLEY: ZEROS DA FUNÇÃO DE PARTIÇÃO - S. Goulart Rosa Jr. e F.A. Bosco - IFQSC/USP - Mostramos que o modelo de Potts p-estados na árvore de Cayley fechada possui uma transição de fase de ordem contínua, quando se considera os efeitos da superfície da rede. Estudamos essa transição do ponto de vista dos zeros da fugacidade da função de partição do sistema, verificando o teorema de Yang-Lee obtido no caso  $p=2$ . O conjunto dos zeros f, no limite termodinâmico, é o conjunto de Julia do mapa de Bethe-Peierls, no regime de baixas temperaturas e um conjunto de Cantor (poeira de Fatou) a altas temperaturas.

**EST/10:55/5A.F** EFEITOS DE FLUTUAÇÕES NA TRANSIÇÃO DE FASE DO TITANATO DE ESTRÔNCIO SOB PRESSÃO. Marcia C. Barbosa e Walter K.Theumann, Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Utiliza-se o grupo de renormalização para o modelo de Potts de três estados, na teoria de campos contínuos com quebras de simetria, para estudar efeitos de flutuações na transição de fase do titanato de estrôncio sob pressão segundo uma direção  $[1+\delta, 1+\delta, 1-2\delta]$ , é «». Determina-se a razão  $\delta_c/\delta_t$  entre os parâmetros críticos e tricríticos,  $\delta_c$  e  $\delta_t$ , mostrando que as flutuações tornam não universal a razão obtida em teoria de campo médio e que o efeito é suficientemente grande para ser detectado experimentalmente. A não-universalidade de razões críticas e tricríticas é resultado das diferentes dimensões dos parâmetros no ponto crítico e tricrítico gerados pelo grupo de renormalização. Estuda-se também a forma de "scaling" da equação de estado em torno do ponto crítico e tricrítico.

**EST/11:15/5A.F** MODELO DE DILUIÇÃO CORRELACIONADA PARA SISTEMAS MAGNÉTICOS

Hilton da Silva Branco, Raimundo Rocha dos Santos e Sérgio Luiz Alves de Queiroz

Usando o método do Grupo de Renormalização no Espaço Real, estudamos, na rede quadrada, um modelo de diluição correlacionada, proposto por J. Albinos O. de Aguiar et al (J. of Mag. Mat., 54-57 (1986) 107-108), onde a interação entre dois sítios primeiros vizinhos depende da ocupação de sítios vizinhos ao longo da linha que os une. A Hamiltoniana pode ser escrita como:

$$H = - \sum_{\langle i, i+\delta \rangle} J_{i,i+\delta} S_i S_{i+\delta} : S_i = \pm 1 \quad \epsilon \\ J_{i,i+\delta} = c_i r_{i+\delta} \cdot [ (1-\alpha) r_{i-\delta} + \alpha ] .$$

onde  $c_i$  é uma variável que pode assumir os valores 0 e 1, com probabilidade  $(1-p)$  e  $p$ , respectivamente,  $\alpha$  é o parâmetro de correlação e  $\delta$  é um vetor da rede.

Não apresentados os diagramas de fase Temperatura crítica versus concentração, para  $0 \leq \alpha \leq 1$ .

**EST/11:35/5A.F** DIAGRAMA DE FASES DE UM ANTIFERROMAGNETO COMPRESSÍVEL - Jair Libero Cadorin e Wagner Figueiredo (Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina).

O diagrama de fases no plano campo magnético versus temperatura de um antiferromagneto é determinado em função da tensão externa. Consideramos aqui um modelo magneto-elástico bastante simplificado onde as forças de cisalhamento são desprezadas. Através de uma transformação unitária apropriada aplicada ao Hamiltoniano magneto-elástico derivamos uma Hamiltoniana efetiva de spins. As interações de intercâmbio ficam agora dependentes da força externa e para  $S \neq 1/2$  surge um parâmetro de acoplamento biquadrático entre spins vizinhos mais próximos. As fronteiras de fase são determinadas utilizando um esquema variacional dentro do espírito de aproximação do campo médio. Na região de baixas temperaturas a fronteira da fase spin-flop-paramagnética é calculada através da expansão em ondas de spin. Mostramos que a transição de fase spin-flop-paramagnética pode ser de primeira ou de segunda ordem dependendo do valor assumido pelo parâmetro de acoplamento biquadrático. É feito um estudo da evolução do ponto bícrítico em função da força externa e do parâmetro de acoplamento biquadrático. Resultados experimentais em antiferromagnétos compressíveis são discutidos.

**EST/11:55/5A.F** CAMPO CRÍTICO TERMODINÂMICO ANTIFERRO - SPIN-FLOP EM ANTIFERROMAGNETOS UNIAXIAIS - Bartira C.S. Grandi e Wagner Figueiredo (Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina)

A fronteira de fase antiferro - spin-flop de antiferromagnets com simetria axial é determinada em função da temperatura. Mostramos que o campo crítico termodinâmico não apresenta nenhum mínimo em função da temperatura para quaisquer valores da anisotropia uniaxial. Em particular mostramos que o campo crítico varia assintoticamente com uma lei do tipo  $T^{7/2}$ . Esse resultado está de acordo com as medidas realizadas para o antiferromagneto uniaxial  $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Em nossa análise determinamos inicialmente os aspectos de energia das ondas de spin nas fases antiferromagnética e spin-flop e o campo crítico termodinâmico é obtido numericamente através da igualdade das respectivas energias livres. Apresentamos ainda os resultados obtidos para a fronteira antiferro - spin-flop de antiferromagnets que apresentam uma anisotropia transversal no acoplamento de intercâmbio.

**EST/8:00/6A.F**

**PONTO DE LIFSHITZ NO MnP : EXPOENTES CRÍTICOS:**

V.Bindilatti, C.C.Secerra e N.F.Oliveira Jr.

O diagrama de fases do MnP no espaço Campo Magnético X Temperatura exibe Pontos de Lifshitz (PL). Estamos realizando medidas para determinar o expoente ALFA, associado ao calor específico, no PL. Análises preliminares dos resultados já obtidos, com o campo magnético paralelo a uma das direções onde o PL é observado, resultam expoentes com valores muito próximos da previsão teórica em primeira ordem em  $\epsilon$ .

**EST/8:20/6A.F**

**Evolução de uma dinâmica caótica a partir da coalescência de atratores universais.** Sergio Gelaschi, Depto Eng.Eletrica-EEBC/USP, 13360- S.Carlos-SP também no CPqD/Telebras, C.P.1579, 13085 - Campinas - SP e Robert L.Zimmerman, Dep. de Física, FFCL-RP-USP, 14100 - Ribeirão Preto - SP.  
A dinâmica complexa de uma grande variedade de sistemas clássicos não lineares tem sido estudada dado o interesse na compreensão da evolução de seus estados caóticos e turbulentos. O objetivo deste trabalho é apresentar um sistema não linear regido por apenas dois parâmetros no qual foi investigada a evolução da sua complexa dinâmica tanto a nível experimental quanto através de simulação numérica. Tal investigação mostrou que a evolução da dinâmica caótica, a partir de estados totalmente dissipativos, advém da coalescência de múltiplos atratores universais. Será também discutido o comportamento dinâmico de outros sistemas não lineares. Tal discussão visa enfatizar que o aparecimento de atratores estranhos em outros sistemas dissipativos, regidos por um número maior de parâmetros, pode advir também da superposição de atratores universais do tipo Feigenbaum, uma vez reduzida a dissipação. Dado o baixo número de parâmetros do sistema por nós estudado e sua simplicidade experimental, foi possível se obter uma completa correlação entre os experimentos e a simulação numérica. Finalmente, algumas questões relativas ao comportamento termodinâmico do sistema serão comentadas. Fenômenos típicos de transições da primeira ordem foram observados estarem associados com as perdas de estabilidade dos regimes periódicos analisados.

**EST/8:40/6A.F**

**A QUESTÃO DA ANÁLISE DE SINAIS EXPERIMENTAIS PARA A EVIDÊNCIA DO CAOS DETERMINÍSTICO.** Nelson Fiedler-Ferrari (Laboratório de Física de Plasmas, Instituto de Física da Universidade de São Paulo).

Sistemas dinâmicos dissipativos que exibem comportamento caótico frequentemente possuem um atrator no espaço de fase que é "estranho". Atratores estranhos são caracterizados por uma dimensionalidade fractal  $D$ . A caracterização de sistemas dinâmicos pode, em princípio, ser feita utilizando vários tipos de medidas (entropia de Kolmogorov, expoentes de Lyapunov, dimensão de Hausdorff, dimensão de informação etc...). Entretanto, ou essas medidas não são aplicáveis para dados experimentais, ou os algoritmos disponíveis não convergem para  $D > 2$ . Uma técnica recentemente desenvolvida (P. Grassberger e I. Procaccia, Phys.Rev. Lett. 50, 366 (1983)) para a análise de atratores estranhos, fornece um meio para se identificar a dimensão fractal de uma série temporal. Esta dimensão, denominada dimensão de correlação, se existir, fornece também uma distinção entre caos determinístico e ruído. Os sinais medidas em experimentos em fusão nuclear são apropriados para a aplicação deste algoritmo. Com efeito, este método já foi utilizado no estudo de flutuações em vários tokamaks, tendo sido obtidos resultados pouco conclusivos. Nesta comunicação, será apresentado o algoritmo de Grassberger e Procaccia e será discutida a sua aplicação às medidas temporais de flutuações magnéticas no Tokamak TBR-I do Lab.Fís.Plasmas do IFUSP.

EST/9:00/6A.F

O MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNETICO COM INTERAÇÕES DE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS. Carmelina M. L. Gomes e Roberto Osório, Departamento de Física, Universidade de Brasília.

O modelo de Ising na rede quadrada com interações antiferromagnéticas de primeiros vizinhos e ferromagnéticas ou antiferromagnéticas de segundos vizinhos apresenta um rico diagrama de fases, como revelado por modelos de campo médio e simulações de Monte Carlo. Tal modelo é tratado neste trabalho na aproximação de Kikuchi, com um quadrado de primeiros vizinhos como aglomerado básico e com quatro sub-redes. Este problema pode ser formulado como um mapeamento em 16 dimensões, que são as diferentes probabilidades de configurações do aglomerado básico. Os pontos fixos deste mapeamento correspondem a mínimos da energia livre do sistema. Os resultados demonstram a rica estrutura do diagrama de fases e levam a uma boa aproximação para as funções termodinâmicas.

EST/9:20/6A.F

RESULTADOS EXATOS DE UM MAPEAMENTO DESCONTÍNUO SOBRE O CÍRCULO. Mário José de Oliveira e Carlos S.O. Yokoi. Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Analisamos uma família de mapeamentos descontínuos sobre o círculo. Mostramos que o número de rotação associado ao mapeamento constitui uma escada do diabo. Obtemos vários resultados exatos incluindo a expressão analítica para a largura da cada degrau da escada do diabo. Usando essa expressão provemos que a escada é completa e que o conjunto de pontos associados a números de rotação iracionais formam um conjunto de Cantor da dimensão fractal nula.

EST/09:AD/6A.F

ESTUDO DOS "PONTOS DE ACUMULAÇÃO" NUM MODELO DE PRENKEL-KONTOROWA COM POTENCIAL PERTURBADO. Carlos S.O. Yokoi. Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

Recentemente Griffiths e Chou<sup>(1)</sup> consideraram o modelo de Frenkel-Kontorow com potencial perturbado definido pela expressão de energia

$$E = \frac{1}{2} \left( u_n - u_{n-1} - \gamma \right)^2 + V(u_n),$$

onde

$$V(x) = \frac{k}{(2\pi)^2} \left[ (1 - \cos 2\pi x) + \epsilon (1 - \cos 4\pi x) \right].$$

Eles observaram que o diagrama de fases do modelo no plano  $\gamma-k$  exibe sequências de "pontos de acumulação" para  $\epsilon > 0$ . Estes pontos refletem mudanças nas condições de ancoramento dos solitões. Nós determinamos numericamente e por um cálculo analítico aproximado a sequência infinita de "pontos de acumulação" observados na fronteira da fase  $w=0$ .

(1) R.B. Griffiths e W.Chou, Phys. Rev. Lett. 56, 1929 (1986).

**EST/IN:15/6A.F** MODELO XXZ - PEIRA LIVRE DE EXPONENTES CRÍTICOS. **F.C.,Alcaraz**  
(Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos)

Mostramos que a criticalidade dos modelos Potts ( $q \leq 4$ ) e Ashkin-Teller pode ser obtida do espectro do modelo XXZ. Obtemos a anomalia conforme, exponents críticos relevantes e irrelevantes destes modelos.

**EST/10:35/6A.F**

**EFEITO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO SOBRE O ESPECTRO DA CADEIA QUÂNTICA DE BLUME-CAPEL**  
Deborah B. Balbão e J.R. Drugowich de Felicio - IFQSC/USP

Estudo numérico do espectro da cadeia quântica de Blume-Capel no ponto tricrítico. Os resultados obtidos foram comparados com as previsões da invariancia conforme que permitiram construir o espectro a partir da combinação das dimensões de escala associadas aos operadores da teoria. O número de anomalia conforme, foi calculado através das correções à energia do estado fundamental de cadeias finitas. Finalmente várias condições de contorno foram utilizadas para investigar a associação entre os operadores e suas dimensões, bem como para calcular os expoentes críticos das funções de correlação na superfície.

**EST/10:55/6A.F**

**ESTUDO DE MODELOS "TIGHT-BINDING" MEDIANTE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO-**

**Sergio A. Cannas, Constantino Tsallis-**  
**Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-**

O formalismo do Grupo de Renormalização no espaço real que substitui redes de Bravais por redes hierárquicas tem se mostrado muito eficiente para sistemas quânticos magnéticos (ex, Heisenberg anisotrópico). Neste trabalho esse formalismo é adaptado ao estudo de um modelo "tight-binding" a temperatura finita.

Discussões em particular o caso da banda semi-cheia, para o qual calculamos os diagramas de fase e classes de universalidade para  $d=1$  e  $d=2$ .

EST/11:15/6A.F

## MOVIMENTO BROWNIANO

CRISTIANE DE MORAIS SMITH / AMIR ORDACCI CALDEIRA / UNICAMP / IFGW.

Quando estamos interessados em estudar o movimento de uma partícula browniana, deparamo-nos com um sistema dissipativo, cuja quantização não é trivial.

Para solucionar isto, ou deve-se tentar modificar os esquemas de quantização, ou então secoope-se a partícula e um reservatório e quantize-se o sistema todo. O segundo procedimento é o que adotamos. O reservatório é representado por um conjunto de osciladores harmônicos e o acoplamento partícula-banho é linear.

Como sabemos, podemos obter toda a informação referente a um determinado subsistema quântico se tomarmos o trago parcial com respeito às variáveis do reservatório 1 do operador densidade do sistema composto. Nesse caso é escrever o operador densidade reduzido do sistema, sujeito a uma condição mais geral da que a proposta por Caldeira-Leggett, que supunham que inicialmente a partícula e o banho estavam desacoplados. O formalismo adotado é o de integrais de trajetória de Feynman.

EST/11:35/6A.F MECÂNICA ESTATÍSTICA DE UMA ESTRUTURA CELULAR ALEATÓRIA 2D. Rita de Almeida e José Roberto Iglesias. Instituto de Física da UFRGS.

Usando o Princípio da Máxima Entropia, nós construímos uma função partição de um sistema de um grande número de células 2D que preenchem um poros ou superposição uma superfície plana. Cada célula é definida por sua posição, área, perímetro e número de lados. A entropia e a energia livre do sistema são calculadas e o valor médio de parâmetros macroscópicos são determinados para a configuração de equilíbrio. Os resultados são comparados para bolhas de sabão e agregados metalúrgicos.

EST/11:35/6A.F DINÂMICA DO MODELO DE KOBAYASHI COM CORREÇÃO ANARMÔNICA PELO MÉTODO DAS FRAÇÕES CONTINUADAS DE MORI-Carlos Eduardo N. Sá Motta(Universidade Federal de Ouro Preto) + Autônio Sérgio T. Pires(Universidade Federal de Minas Gerais)

O método de Mori para a expansão da função-memória em frações continuadas foi utilizado no estudo da dinâmica do modelo de Kobayashi. Num primeiro estudo, foram desconsideradas as funções de correlação das variáveis de fonons e spins e foi obtida uma largura de linha não-nula para o espectro. Estudos posteriores mostraram que o fato de se desprezar as funções de correlação cruzadas introduzia uma largura de linha sem significado físico. Pires desenvolveu um método para tratar os operadores acoplados. Quando aplicado ao modelo de Kobayashi esse método resultou numa contribuição nula, por parte dos fonons, para a largura de linha. A introdução da correção anarmônica não desfez esse quadro, provavelmente em virtude do caráter das aproximações utilizadas. O nosso objetivo foi o de procurar outras aproximações, que resultassem numa contribuição não-nula dos fonons para a largura de linha.

**EST/PAINEL**

**CORREÇÃO QUÂNTICA DA MASSA DO SÓLITON NO TMIC** - Sérgio Luiz Talim e  
Antônio Sérgio Teixeira Pires, Departamento de Física , ICEx, UFMG  
CP 702, Belo Horizonte, MG, Brasil.

Será apresentado a correção quântica da massa do sóliton no antiferromagneto unidimensional (TMIC), utilizando o método WKB. O resultado será comparado com o sóliton de sine-gordon, utilizado comumente como modelo para as correções quânticas de efeitos não-lineares em TMIC.

**EST/PAINEL**

**MCRG PARA MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES DE MULTISPIN** - Nestor Caticha e J.R. Drugowich de Felicio - IFQSC/USP

Obtém-se o diagrama de fases e os expoentes críticos para um modelo de Ising com interações de 3 spins em uma das direções. A técnica utilizada é a do Grupo de Renormalização via Monte-Carlo.

**EST/PAINEL**

**PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE HUBBARD: UMA ABORDAGEM NÚMÉRICA**.

Antônio M.S. Macêdo e Cláudio A. Macêdo (Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe).

Estamos investigando propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard de uma banda por uma abordagem de análise numérica direta no espaço real. Desenvolvemos um algoritmo para geração por computador de hamiltonianos matriciais algébricos para o modelo. Resultados preliminares para susceptibilidade magnética, calor específico, entropia e funções de correlação para sistemas com pequeno número de sítios são discutidos.

**EST/PAINEL**

**CONDUTIVIDADE EM SISTEMAS DESORDENADOS**

Andrea Latgé e Enrique Andrade (U.F.P.)

Estudam-se as propriedades eletrônicas e de transporte de sistemas com desordem composicional e estrutural.

Foi desenvolvido um formalismo no qual se fez possível escrever a condutividade na forma de uma equação de Dyson, o que possibilitou o seu cálculo utilizando técnicas de renormalização no espaço real.

Para sistemas unidimensionais resultados preliminares indicam que a condutividade escala-se exponencialmente com o comprimento da amostra.

No caso de sistemas com desordem configuracional, representados por uma rede de Bethe foi possível encontrar uma região de estados localizados e outra de estados extendidos com a correspondente borda de mobilidade.

**EST/PAINEL**

**MODELO DE SPIN M-VETORIAL COM LIGAÇÕES ALEATORIAMENTE DISTRIBUIDAS - DIAGRAMA DE FASES.** Marcelo L. Lyra e S. Coutinho, Departamento de Física da UFPE.

Utilizando a técnica do grupo de renormalização no espaço real na aproximação de campo médio na sua forma mais simples, a qual nós mostramos ser equivalente a aproximação de Bethe-Pleirris, nós determinamos as linhas críticas das fases ferro, antiferromagnética e de vidro de spin para o modelo de spins m-vetoriais com ligações aleatoriamente distribuídas, no limite temperado, segundo uma distribuição  $p(J_{ij})$  qualquer. Os diagramas de fases no plano  $T \times p$ , foram levantados para  $p(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J_1) + (1-p)\delta(J_{ij} - J_2)$ , em função de  $mJ_1/J_2$ , de número de coordenação Z e da dimensionalidade m dos spins m-vetoriais.

**EST/PAINEL**

**PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE MODELOS DE ISING EM SUPER-REDES - Wagner Figueirado e João Antônio Flascak - Departamento de Física/UFGSC e Departamento de Física/UFSC.**

Consideramos um modelo simples de Ising de spin-1/2 numa super-rede consistindo de um meio estreitificado de espessura  $N_1$  com interações  $J_1$  intercalado por outro meio de espessura  $N_2$  com interações  $J_2$ . Diferentes meios interagem com um parâmetro de troca  $J_0$ . Estamos estudando o diagrama de fases em função dos parâmetros acima mencionados empregando a técnica aproximada de campo médio usual bem como o grupo de renormalização fenomenológico proposto por Nightingale para o comprimento de correlação.

**EST/PAINEL**

**COMPLEXOS DIPOLARES EM FILMES DE HÉLIO LÍQUIDO.** Maria Gorette Cavalcante, Marcos H. Degani and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP)

Em filmes de  $\text{He}^4$  líquido existe a possibilidade de formação de um complexo ligado constituído por um íon positivo no interior do filme e um elétron na superfície do líquido. Este composto é conhecido com o nome de dipion. Neste trabalho calculamos a interação efetiva de um dipion considerando sua interação com os ripplons em função da espessura do filme de  $\text{He}^4$  líquido.

**EST/PAINEL**

**TRANSPORT PROPERTIES OF SEMICONDUCTORS PLASMAS UNDER HIGH DC ELECTRIC FIELDS.**

V.N. Freire, A.R. Vasconcelos, and R. Luzzi, Instituto de Física, DFESCM - UNICAMP.

We consider the question of how the evolution of the nonequilibrium state of a highly photoexcited plasma in polar semiconductors affects the transport properties of hot carriers under high DC electric fields. For that purpose we resort to a nonlinear transport theory for many-body systems arbitrarily away from equilibrium based on the nonequilibrium statistical operator (NSO) method in Zubarev's approach [1]. We show the temporal evolution to the stationary state of the dynamical variables of interest and establish a criterium for overshoot to occur.

1. D.N. Zubarev, *Neravnovesnaja Termodynamika Statischekaiia* (Izd. Nauka, Moscow, 1970) [English Transl.: *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (Consultants Bureau, New York, 1974)].

**EST/PAINEL**

**DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE ASHKIN-TELLER NA REDE DE BETHE.** Francisco A. da Costa, Mário J. de Oliveira e Silvio R.A. Salinas, (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Apresentamos um procedimento iterativo para estudar as propriedades locais do modelo de Ashkin-Teller, dado pelo hamiltoniano

$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (T_i T_j + S_i S_j) - p \sum_{\langle ij \rangle} T_i T_j S_i S_j$ , onde  $T_i = \pm 1$  e  $S_i = \pm 1$ , numa árvore de Cayley de coordenação 2. O problema consiste em estudar um espaçoamento tridimensional em termos dos valores esperados  $\langle T \rangle$ ,  $\langle S \rangle$  e  $\langle TS \rangle$  das variáveis de spin. No limite de coordenação infinita (que corresponde a uma solução de campo médio numa rede de Bravais) obtemos um diagrama de fases que concorda com resultados da literatura para  $J>0$ ,  $p>0$ . Para  $p<0$ , no entanto, detectamos a existência de uma nova fase, que é estável numa pequena região do plano  $T-p$ . O diagrama de fases é completamente determinado através de uma análise da energia livre na rede de Bethe. No momento estamos estudando o efeito de redes com coordenações finitas e da presença de termos assimétricos no hamiltoniano original.

**EST/PAINEL** DESORDEM XY INDUZIDA POR PAREDES DE DOMÍNIO NO MODELO XY TOTALMENTE FRUSTRADO.  
Enzo Granato, MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, CP: 515, 12201 - São José dos Campos,  
SP, Brasil.

Apresenta-se uma discussão da transição de fase mediada por defeitos no modelo XY totalmente frustrado. O grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff é empregado para investigar o comportamento crítico de um modelo similar que se encontra na mesma classe de Universalidade que o modelo XY frustrado. O diagrama de fase resultante mostra que a ordem do tipo XY não pode coexistir com desordem do tipo Ising. Isto concorda com o cenário da transição de fase no modelo XY frustrado sugerido recentemente.

**EST/PAINEL** MODELO BEG COM ANISOTROPIA ALEATÓRIA. Vera S. Henriques, Instituto de Física,  
USP, Carlos E.L.Carneiro, Instituto de Estudos Avançados, CTA e Silvio E.A.Salinas, Instituto de  
Física, USP.

O modelo de Blume-Capel (modelo BEG com coeficiente nulo para o termo biquadrático) apresenta um diagrama de fases semelhante ao de um sistema metamagnético. No plano  $D/J \times k_B T/J$ , onde  $J$  e  $D$  são os coeficientes dos termos de troca e de anisotropia, respectivamente, e  $T$  é a temperatura, há uma linha de coexistência que termina num ponto tricírtico, prolongando-se como uma linha de pontos críticos. Está em estudo o efeito da aleatoriedade no termo  $D$  sobre as características do diagrama de fases deste modelo. Resultados de campo médio estão sendo obtidos com uma técnica desenvolvida por van Beijnen. O efeito das flutuações será estudado através de técnicas de grupo de renormalização.

**EST/PAINEL** "ESTUDOS DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO APLICADOS A SISTEMAS ADSORVIDOS"  
M.S.O. Magalhães; Instituto de Física da UFRJ e E.V.L. de Mello; Departamento de Física da UFF.

Moléculas de Deutério adsorvidas em sub-moncamadas em Grafite, podem ser descritas pelo Modelo de Gás de Bots em uma rede triangular com interações repulsivas entre primários vizinhos e atrativas entre vizinhos superiores. Tal situação pode ser representada por um Hamiltoniano que pertence a mesma classe da universalidade do Modelo de Potts de 3-estados. Fizemos um tratamento de Grupo de Renormalização no espaço das posições utilizando as aproximações iterativas de Migdal-Kadanoff na rede triangular e analisamos o diagrama global de fase no espaço dos parâmetros da interação entre as moléculas do adsorvado e do potencial químico. O diagrama de fase, densidade x temperatura, obtido foi comparado com resultados experimentais. Pudemos observar que o comportamento previsto está em grande acordo com os resultados obtidos experimentalmente.

**EST/PAINEL**

**ANTIFERROMAGNETO EM CAMPO UNIFORME COM DILUIÇÃO POR SÍTIOS**

**S. M. de Oliveira, P.M. de Oliveira e H.A. Continentino (UFF)**

É estudada a diluição por sítios no modelo de Ising antiferromagnético (rede quadrada) em um campo uniforme através do Grupo de Renormalização no Espaço Real. A célula utilizada é autodual e preserva a simetria das subredes. Como no caso do problema van diluição o acoplamento com o campo é proporcional ao número de coordenação do sítio (Reinundo R. dos Santos, J.Phys.C10 (1983)). Apresenta-se o diagrama de fases obtido no espaço  $P\beta T\Omega$  onde  $P$  é a concentração,  $T$  a temperatura e  $H$  o campo aplicado. Desejamos comparar os resultados obtidos com os de R.R. dos Santos e G.L.A. de Queiroz que vêm trabalhando no mesmo problema com diluição por ligações.

**EST/PAINEL**

**ORDENAÇÃO PARCIAL NO MODELO BEG. Roberto Osório (Departamento de Física, UnB, Brasília), Mário J. de Oliveira e Silvio R. Salinas (Instituto de Física da USP, São Paulo).**

O modelo de Blume, Emery e Griffiths (BEG) no espaço par é dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_i S_i^z + D \sum_i S_i^x$$

onde  $S_i = +1, 0, -1$  para qualquer sítio  $i$  de uma rede cristalina. Na região em que  $K/J < 1 < D/J < 0$ , onde  $z$  é a coordenação da rede, o estado fundamental deste hamiltoniano apresenta uma fase pouco discutida na literatura, caracterizada por um ordenamento quadripolar de subredes, com magnetização local nula. Utilizamos uma árvore de Cayley, no limite de coordenação infinita, para formular as soluções de campo médio do modelo BEG como um problema de mapeamento. Uma análise dos limites de estabilidade dos pontos fixos, complementado pelo estudo das energias livres correspondentes, fornece uma imagem do diagrama global de fases deste sistema. Está em andamento um estudo do problema para árvore de Cayley com coordenação finita.

**EST/PAINEL**

**ESTRUTURAS COMENSURÁVEIS, INCOMENSURÁVEIS E CAÓTICAS DE UM MAPEAMENTO BIDIMENSIONAL. Américo T. Bernardes e Mário J. de Oliveira. Instituto de Física - USP.**

Analisamos numericamente o mapeamento bidimensional  $\phi \rightarrow \phi'$  e  $M \rightarrow M'$  definido por:

$$\tan \phi' = \frac{M \sin(\phi + \delta)}{h + M \cos(\phi + \delta)} \quad \text{e} \quad M' = \frac{I_1(BJr)}{I_0(BJr)}$$

$$\text{onde } r = (h^2 + M^2 + 2hM \cos(\phi + \delta))^{1/2}$$

descrito pelos parâmetros  $h \geq 0$ ,  $\delta$  e  $T$ . O mapeamento pode ser interpretado como a solução na árvore de Cayley de coordenação infinita do modelo xy quiral na presença de um campo. O diagrama de fases  $h\delta T$  apresenta regiões correspondentes a estruturas comensuráveis, incomensuráveis e caóticas.

**EST/PAINEL**

**MODELO DE ISING DE SPIN S=1 COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS NA REDE DE BETHE.** Crisópolo R. da Silva (Departamento de Física da UFAL) e Sergio G. Coutinho (Departamento de Física da UFPE).

O diagrama de fases e as propriedades locais do modelo de Ising de spin S=1 na rede de Bethe com número de coordenação arbitrário foram estudadas considerando-se interações entre primeiros e segundos vizinhos mais próximos, anisotropia e um campo magnético externo. A introdução do parâmetro anisotrópico induz o aparecimento de novas fases além das fases ferro, paramagnética e moduladas presentes no modelo com spin 1/2 [1]. Além disso, observamos uma considerável diminuição dos efeitos de frustração característicos da fase modulada. A função de partição, a magnetização local e a função de correlação local entre pares de spins vizinhos mais próximos, são calculadas exatamente em função dos pontos fixos de convergência das relações de recorrências dos campos efetivos definidos apropriadamente.

[1] J. Vannimenus, Z. Phys. B43, 141, (1981).

**EST/PAINEL**

**MODELO CELULAR PARA MICROEMULSÕES.** Jürgen F. Stilck, Instituto de Física da USP.

O modelo celular para microemulsões (fases bicontínuas em misturas de água, óleo e detergente) proposto por Wheeler<sup>(1)</sup> é consideravelmente simplificado quando o detergente é confinado na interface água-óleo. Neste limite, obtemos um modelo de Ising com interações de primeiros vizinhos, segundos vizinhos e termos de três spins

$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle ijk \rangle} (S_1 S_k + S_2 S_k + S_3 S_k) - h \sum_i S_i$ ,  $S_i = \pm 1$ , onde a soma  $\sum_{\langle ijk \rangle}$  é sobre todos os conjuntos de três sites na rede que formam um ângulo reto, de tal forma que os sites dos extremos sejam segundos vizinhos. Nesse caso, recentemente, propõe um modelo semelhante a este para microemulsões. No caso  $J_3 = 0$ , este modelo foi bastante estudado na rede quadrada<sup>(2)</sup>. Estamos estudando a sua solução na rede de Bethe, obtendo diagramas de fases semelhantes aos do modelo ANNNI<sup>(3)</sup>, onde as fases moduladas correspondem à microemulsão.

Ref.:

- (1) J.C.Wheeler, comunicação particular (85)
- (2) B.Widom, preprint Corneel (85)
- (3) M.N.Barber, J.Phys. A: Math.Gen. 12, 679 (79)
- (4) C.S.O.Yokoi, M.D.Coutinho Filho e R.S.Balinas, Phys.Rev. B26, 4047 (81)

**EST/PAINEL**

**OPERADOR DE INTERCAMBIO PARA SPINS DE ALTAS ORDENS.**

Jenner Barreto Bastos Filho (Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas).

Imbuída do espírito do presente congresso, esta comunicação reflete muito mais uma dúvida que um caminho.

Schrödinger, em 1941, estudou o operador de intercambio para spins de altas ordens. Brown, em 1972, apresentou um método algébrico especialmente simples para explicitar o operador de intercambio para partículas de qualquer spin. Para spin meio, a relação particularmente simples entre o operador de intercambio  $P_{ij}$  e o produto escalar  $(S_i, S_j)$  permite, através da representação constituída pelas matrizes de Pauli e os spinores "up" e "down", um tratamento direto. Para spins de altas ordens (spins maiores que meio), a relação é mais complicada.

Pergunta-se, para esse caso, quais as possibilidades de uma representação adequada e viável.

**EST/PAINEL**

A KONDO LATTICE STUDY      Leonardo Gregory Brunnet, Rajane M. R. Teixeira e  
Jose Roberto Iglesias - Ufrgs

A Kondo lattice like system is studied through a Green function method. The density of states of this system is obtained solving exactly the Green function for two hybridized atomic levels, one of them with coulombian repulsion, and subsequently a hopping is introduced using Dyson's equation. For the moment all computations are made at zero temperature.

**EST/PAINEL**

**MODELO Z(6): MÉTODO DE CORTE-COLAPSO E DIAGRAMA DE FASE.** Ananias Monteiro Mariz <sup>+</sup>, Aglae Cristina Navarro da Magalhães, <sup>\*</sup> Luciano Rodrigues da Silva <sup>+</sup>, e Constantino Tsallis <sup>+</sup> (+ Universidade Federal do Rio Grande do Norte, \*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas).

Estendemos para o modelo Z (6) o método de Corte-Colapso desenvolvido inicialmente para o modelo de Potts e generalizado para outros sistemas, tais como os modelos Z(4) e Z (5). Este método permite a realização de traços parciais em quaisquer grafos de dois terminais sem o exame de configurações. Mediante a aplicação deste algoritmo obtemos, através da técnica de grupo de renormalização no espaço real, o diagrama de fase do modelo Z (6) ferromagnético na rede quadrada.

**EST/PAINEL**

**INFINITOS OPERADORES PRIMÁRIOS EM CADEIAS COM DEFEITOS - J.R. Drugowich de Felício - IFQSC/USP**

Estuda-se o espectro de cadeias quânticas com defeitos com o objetivo de encontrar as dimensões anômalas dos operadores primários da teoria.

**INSTRUÇÃO**

**Coord.: - Jorge Humberto Nicola (UNICAMP)**

**INS/8:20/4A.F**

**TRÍODO DE CORONA COM CORRENTE CONSTANTE. RESUMO DOS PRINCIPAIS RESULTADOS.**

**José A. Giacometti, Instituto de Física e Química de São Carlos.**

O tríodo de corona é uma técnica que vem sendo utilizada para o estudo das propriedades de transporte e armazenamento de cargas elétricas em filmes finos de polímeros. A técnica consiste em depositar na amostra, através de uma grade metálica, os íons produzidos por uma descarga corona e medir simultaneamente o potencial da superfície e a corrente de carga da amostra durante e após o processo de deposição dos íons. Além disto, a corrente de carga da amostra pode ser mantida constante. Este trabalho é feito um resumo dos principais resultados até então obtidos, envolvendo os seguintes aspectos da técnica: controle da corrente de carga, uniformidade da deposição dos íons sobre a amostra e ruídos nas medidas. Também são discutidos os modelos teóricos e as suas aplicações na interpretação dos resultados experimentais obtidos em diferentes polímeros.

**INS/8:40/4A.F**

**TÉCNICAS DE MICROSCOPIA ELETRÔNICA DE VARREDURA PARA AVALIAÇÃO DE CIRCUITOS INTEGRADOS. A.C.S.Ramos, C.A.Ribeiro -(Laboratório de Pesquisas em Dispositivos - IFGW - Uninamp).**

O recente avanço na tecnologia de fabricação de circuitos integrados de alta densidade, que visa o aumento do número de funções em um mesmo "Chip", acarretou a necessidade de estudos mais detalhados sobre a confiabilidade destes dispositivos, e que levou por sua vez ao desenvolvimento de métodos mais sofisticados para a avaliação e caracterização dos dispositivos.

Estamos desenvolvendo presentemente, para aplicação em nosso microscópio eletrônico de varredura, um método para obtenção de imagens de corrente induzida por feixe eletrônico (EBIC), que permite caracterizar as funções nestes dispositivos e juntamente com outras medidas também obtidas no microscópio e.g. contraste de voltagem, permitem obter uma avaliação do dispositivo.  
(FAPESP; TELEBRÁS S.A.)

**INS/9:00/4A.F**

**TÉCNICA DE OBTENÇÃO DE IMAGENS ATRAVÉS DE ESPECTROSCOPIA FOTO-ACÚSTICA.**

**José Carlos Rossi, Valentin Obac Roda e Michel A. Augerter, Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo.**

A técnica de espectroscopia foto-acústica, está baseada na geração de ondas acústicas por um material devido à absorção do mesmo. Este efeito se dá devido ao gradiente de temperatura formado a partir de um ponto onde incide um feixe de luz, que produz mudança na densidade do ar que o circunda. A onda gerada pode ser detectada, amplificada, e fornecerá informações sobre a absorção ótica local.

Este efeito nos sugere, então, a possibilidade de um mapeamento de qualquer superfície sólida, mediante a aquisição de sinal acusto-ótico ao longo da mesma.

Para este finalidade está sendo implementado um sistema capaz de defletir numericamente um feixe colimado de LASER sobre uma determinada amostra encerrada no interior de uma câmara de efeito foto-acústico. A reflexão do feixe é acompanhada ponto a ponto pela detecção por amplificação síncrona dos sinais acusto-óticos, que posteriormente são digitalizados.

Um computador compatível ao IBM PC é utilizado para fazer o controle do equipamento e a aquisição de dados. Um software específico faz o processamento dos sinal e gera uma tela representativa da absorção ótica mediante a distribuição de níveis de cinza a cada sinal.

**INS/9:20/4A.F** SISTEMA PARA DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS DE POLÍMEROS ORGÂNICOS PRODUZIDOS EM PLASMAS - R.P. Homero Santiago Meciel, Jayr de Amorim Filho, Roberto Antonio Stempniak, Carlos Viana Speller (Departamento de Física do ITA, CTA, São José dos Campos, SP) e Mário Antonio Bica de Moraes (IFGW - UNICAMP, Campinas, SP).

As características de um sistema para a produção e estudo de polímeros orgânicos através de plasma produzido por descargas RF em atmosferas compostas de misturas de monômeros orgânicos, são apresentadas. Pretende-se obter filmes finos desses materiais, com características ópticas. Estuda-se, também, a influência dos parâmetros da descarga sobre as suas propriedades, bem como, a análise mais detalhada da composição e da físico-química envolvida, particularmente na região de interação plasma-superfície, através de técnicas de espectrometria óptica e de massas. (FINEP).

**INS/9:40/4A.F** EFICIÊNCIA QUÂNTICA DOS CINTILADORES NaI:Tl - Wilson José Heroldo Calle, José Pedro Andrade, Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo e Robert Lee Zimmerman, Centro de Instrumentação, Dosimetria e Radioproteção, Universidade de São Paulo.

Cristais de NaI dopados com Tálio acoplados os fotomultiplicadores são os mais aproveitados detectores da radiação eletromagnética de energia superior de 30 keV. A alta densidade eletrônica proporciona uma alta probabilidade, pelos efeitos fotoelétrico e Compton, da produção de um elétron rápido para cada raio gama incidente. O pequeno alcance deste elétron assegura que a energia do raio gama seja totalmente transformado em pares de íons. A transferência desta energia iônica para os centros ativos resulta em um número de fótons proporcionais à energia do raio gama. Quase independente do tamanho do cristal, contribuiam a pureza do cristal, a otimização da dopagem, a refletividade da encapsulação e o acoplamento ótico a válvula fotomultiplicadora para a melhor nível conversão linear da energia de raio gama num número de fotoelétrons disponível para a subsequente amplificação e análise. No IQSC-USP Cristais cilíndricos de NaI dopados com 1% Tálio recebem um polimento e encapsulamento hermético com uma face acoplada de uma janela de quartzo compacta de silício e as outras faces cobertas de Óxido de Magnésio. No CIDRA-USP caracterizamos os cintiladores através de medidas da altura e distribuição dos pulsos eletrônicos que resultam de raios gama de  $\text{Ce}^{137}$  com energia de 663 keV. A largura da distribuição dos pulsos revela o número de fotoelétrons/keV produzido pela radiação gama, isto é, a própria natureza quântica da luz produzida no cintilador. Nossos cristais de NaI cuidadosamente encapsulados e dopados com Tálio demonstram uma conversão quântica comparável com os fornecidos no exterior. (CNEB).

**INS/10:15/4A.F** DEPENDÊNCIA ENERGÉTICA DE DIFERENTES INSTRUMENTOS DETECTORES DA RADIAÇÃO BETA - Maria da Penha P. Albuquerque, Marcos Xavier e Linda V.E. Caldas (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), Comissão Nacional de Energia Nuclear São Paulo).

O sistema padrão secundário de radiação beta dos laboratórios de calibração do IPEN, de qual fazem parte fontes calibradas de  $^{90}\text{Sr} + ^{90}\text{Tl}$  (50 e 2 mCi),  $^{28}\text{Ti}$  (2 mCi) e  $^{147}\text{Pm}$  (14 mCi), foi utilizado para a determinação da dependência energética dos principais instrumentos monitores da radiação. Foram estudados os aparelhos portáteis do tipo Geiger-Müller, câmaras de ionização cilíndricas, dosímetros de bolso e sistemas sonoros, assim como as câmaras de ionização de placas para telas. Os resultados foram comparados com os obtidos com a câmara de extrapolação, que é o sistema de referência para detecção da radiação beta, e com dosímetros termoluminescentes.

INS/10:35/4A.F

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA PARA MEDIDA DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA ATRAVÉS DO MÉTODO DAS TEMPERATURAS PERIÓDICAS - Victor Bertucci Neto, Odílio B.G. Assis e Bernhard J. Mokross - Inst. de Física e Química de São Carlos - USP.

Dentre as várias técnicas utilizadas para medir-se a difusividade térmica em certos tipos de materiais, o método das temperaturas periódicas é um dos que apresenta maiores precisões e vantagens, tais como: redução do efeito de perdas por radiação, utilização de amostras em tamanhos reduzidos, rapidez de leitura e uma razoável relação sinal-ruído.

Em nosso trabalho, particularmente, optamos por esse método para determinação das características térmicas de ligas Silício-Germanio.

Apresentaremos um estudo inicial comparando dois sistemas provenientes do método da Angstrom modificado onde será proposta uma substituição no aquecedor senoidal.(FAPESP).

INS/10:55/4A.F

SENsoRES DE TEMPERATURA POR FIBRAS ÓTICAS UTILIZANDO FILMES DE SILÍCIO HIDROGENADO AMORFO

Edmundo A. Soares e Luís Carlos G. Valente  
Dept. Eng.Telocomunicações - UFV

Nos últimos anos, vários tipos diferentes de termômetros utilizando fibras óticas tem sido propostos utilizando uma grande variedade de materiais sensores, técnicas de detecção, faixa de trabalho e precisão.

Entre os vários tipos, aqueles que se baseiam na variação da intensidade da luz são os mais simples. Nesta comunicação, descrevemos um termômetro projetado para medir a temperatura de transformadores ( $20^{\circ}$  -  $200^{\circ}$  C) utilizados no sistema de distribuição de potência da cidade do Rio de Janeiro.

O termômetro utiliza duas fibras de Índice de grau ( $200 \text{ nm de diâmetro}$ ) e um LED de GaAs modulado em  $1\text{kHz}$  como fonte de luz. O material sensor de temperatura é um filtro de absorção ótica consistindo de um filme de silício hidrogenado amorfo depositado sobre um vidro de  $\text{SiO}_2$ . Em uma das faces o vidro é recoberto com uma camada antirefletora de modo a maximizar a luz transmitida. Na outra face, deposita-se uma camada refletora. A luz proveniente de uma fibra é refletida para a outra passando duas vezes pelo filme A-Si-H. A luz filtrada é medida por um detector PIN e comparada com um sinal de referência.

Uma vez que o "gap" do material que forma o filme pode ser mudado pela concentração de hidrogênio e a inclinação do limiar de absorção para a espessura do filme, discutimos a possibilidade de obter alta sensibilidade em faixas menores usando uma fonte monocromática. O limite teórico de sensibilidade é analisado e alguns resultados experimentais são apresentados.

INS/11:15/4A.F

DISPOSITIVO PARA REFRIGERAÇÃO TERMOELÉTRICA - Luis V.A. Scalvi,  
Odílio B.G. Assis e Bernhard J. Mokross - Instituto de Física e  
Química de São Carlos - U.S.P.

O dispositivo em desenvolvimento funciona com base no Efeito Peltier. A Figura de Mérito (2) caracteriza a eficiência do termoelemento. Os semicondutores apresentam as maiores figuras de mérito conhecidas, como por exemplo, as ligas  $(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{90}(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_5(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_5$  dopada com  $\text{SbI}_3$  (tipo n) e

$(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{72}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{25}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_3$  dopado com excesso de Te (compensação) do tipo p<sup>1</sup>.

Estes materiais são crescidos pela técnica Bridgman vertical, pois o crescimento deve ser direcionado, devido à anisotropia destes materiais com relação às propriedades termoelétricas. Estamos trabalhando no desenvolvimento destes materiais bem como em equipamentos para caracterização e medidas de propriedades termoelétricas.

(FAPESP)

**INS/11:33/4A.F**

**PROGRAMADOR E CONTROLADOR DE TEMPERATURA PARA FORNOS RESISTIVOS COM RESOLUÇÃO DE 0,1°C.** Genné Eduardo Calvo Nogueira, Sonia Licia Baldochi e Spero Penha Morato. (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Desenvolveu-se um sistema destinado a programação e controle de temperatura para fornos resis-tivos normalmente utilizados em crescimento de cristais. O controlo de temperatura possui resolução de 0,1°C para faixa de 0 a 999,9°C, e a estabilidade é de 0,04°C e apresenta "Over Shut" inferior a 0,5% para degraus de 50% da potência máxima. O sistema de controle basia-se na correção do sistema pela aproximação por um sistema de segunda ordem, dispondo de controles de banda proporcional, integrador e derivador.

**INS/11:55/4A.F**

#### **SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS POR LONGOS PERÍODOS DE TEMPO.**

Antonio Augusto Souza Brito - Universidade Federal da Paraíba.

Em algumas experiências físicas é necessário a aquisição de dados por lon-gos períodos de tempo. Para tanto estamos construindo um sistema automatizado de aquisição de dados compreendendo: sensores (temperatura, humidade, pressão atmosférica, etc...); interface com microprocessador, sistema de armazenamen-to e transporte de informações.

O conjunto básico consiste de: microprocessador Z-80A, porta paralela PPI 8255; conversor A/D 8 bits multiplexado em 8 canais ADC 808; memória RAM CMOS de 2 K.6116; sistema de alimentação com baterias Ni-Cd para alimentação autô-noma no transporte da memória RAM, EPROM 2732A para armazenamento do programa residente.

Embora o projeto inicial esteja voltado para a aquisição de dados atmosféri-ricos ele poderá ser utilizado em outros processos de monitoração por longos períodos de tempo (dias ou semanas) quando a rapidez no tempo de aquisição não é um fator crucial.

**INS/8:00/5A.F** PROJETO E CONSTRUÇÃO DE ESPECTROFLUORÍMETRO COM RESOLUÇÃO TEMPORAL  
José Niremi Hirata, Carlos McDowell, Carlos K. Takata e Amando S. Ito. Instituto de  
Física da USP.

O emprego de técnicas de espectroscopia por fluorescência com resolução temporal tem contribuído significativamente para a compreensão de processos dinâmicos, físicos e químicos na biologia molecular. No sentido de ampliação dos trabalhos que o Grupo de Biofísica do IFUSP tem se dedicado, projetamos e estamos construindo um espectrofluorímetro que permite a discriminação temporal de eventos que se situam na faixa de 10<sup>-8</sup> segundos. A excitação da amostra se faz com uma lâmpada pulsa de descarga em gases e o perfil temporal da emissão fluorescente é obtido através da técnica de contagem de fôtons e determinação de tempos de correlação entre o pulso de excitação e a emissão fluorescente.

**INS/8:20 / 5A.F** CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA DE MICROONDA PARA ESPECTROSCOPIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA EM BANDA S(1,3 a 4,0 GHz) - JOSÉ CARLOS SARTORI, OCTACIRIO RANGEL NASCIMENTO, QESCI/IFQSC. A conveniência em se utilizar um espetrômetro de RPA em banda S é permitir o estudo de amostras que apresentam estruturas paramagnéticas vindas das interações hiperfinais e superfinais parcialmente resolvidas. O sistema em desenvolvimento basicamente é composto de um oscilador que opera na faixa de 1,0 a 2,0 GHz, uma cavidade do tipo "LOQP GAP" que abriga a amostra a ser analisada, acopladores direcionais, circuladores, atenuadores, detector, sistema de AFC e pré-amplificador. Todo o arranjo compõe uma ponta de microonda que é adaptada ao console do espetrômetro Varian do Laboratório do Grupo de Biofísica do IFQSC. No sistema apresentando os estágios de CAP, pré-amplificador e cavidade ressonante foram todos desenvolvidos localmente. Algunas medidas já foram efetuadas e os resultados iniciais mostraram-se animadores, comprovando a viabilidade da adaptação. Uma etapa a ser vencida ainda, é melhorar a relação sinal-ruído do sistema.

**INS/8:40/5A.F** SISTEMA DE CONTROLE E AQUISIÇÃO PARA TOMOGRAFIA POR RMN. André Torre Neto, Ma-  
teus José Martins e B. Panepucci (Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de  
Física e Química de São Carlos, USP).

Este sistema controla uma experiência de ESR pulsada, particularmente para a obtenção de imagens com essa técnica. Tem como partes fundamentais um módulo digitalizador de transientes e uma CPU mestre. Ele é capaz de digitalizar transientes, PIDs ou ecos no caso da ressonância, com uma resolução de 12 bits (- 244 ppm). Possui dois canais de entrada que registram os sinais em 256, 512 ou 1024 palavras de memória. O intervalo entre as digitalizações ("dwell-time") é de no mínimo 40 μs e no máximo 1 ms. Um retardo de até 16 ms pode ser ajustado entre o sinal de disparo ("trigger") e o início da digitalização. Todos esses parâmetros podem ser programados pelas interfaces paralela ou serial que fazem a transferência de dados para a CPU mestre. O sistema pode ainda prover a processação ("average") dos sinais adquiridos para melhorar a relação sinal/ruído. Todo o processo de aquisição é acompanhado num monitor x-y para um ajuste adequado dos parâmetros. Esse monitor é capaz de mostrar ainda algum processamento local, pela CPU mestre, dos dados adquiridos. Ele tem sido utilizado para se observar a transformada de Fourier unidimensional que grava a um coprocessador aritmético é realizada em 2 segundos para 256 pontos. Na CPU mestre estão instalados conversores digital/análogicos e canais de interrupção que controlam a geração de gradientes de campo. Algumas das características acima podem ser alteradas, refazendo-se o software. Por exemplo, o tamanho dos registros pode ser aumentado para 2048 palavras ou ao invés da média pode-se subtrair dois sinais. O sistema permite uma certa versatilidade podendo por isso servir a outros propósitos.

**INS/9:00/5A.F** CÂMARA FOTOTÉRMICA ABERTA PARA MEDIDAS "IN-VIVO". Mauro Henrique de Paula(EMBRAPA-UAPDIA), Aparecido A. Carvalho(Faculdade de Engenharia - Campus de Ilha Solteira-UNESP), Lucas M. Alves e Michel A. Asgerter (Instituto de Física e Química de São Carlos-USP).

Desenvolvemos uma câmara fototérmica aberta particularmente adequada para medidas espectroscópicas "in-vivo". O elemento chave é um transdutor piezo-pireoelétrico transparente tal como um cristal de LiNbO<sub>3</sub> ou quartzo cristalino. Com a nova câmara, que pode ser acoplada a um cabo ótico, obtivemos espectros "in-vivo" e "in-vitro" de folhas de aveia ("Polypodium Adiantum") na região de  $400 < \lambda < 800\text{nm}$ , que compreende a banda de clorofila. A resposta do transdutor é linear e proporcional à potência da feixe de luz em pelo menos 3 ordens de grandeza. Utilizando o Níobeto de Lítio como transdutor e Carbono como amostra podemos medir feixes com potência de até 10 W (razão sinal/ruido = 1). O quartzo, apesar de ser cerca de 80 vezes menos sensível que o LiNbO<sub>3</sub>, pode ser empregado no ultra-violeta próximo em comprimentos de onda menores que 320nm onde este último cristal não pode ser utilizado devido a sua opacidade nessa região espectral.

(FINEP, FAPESP, CNPq, EMBRAPA).

**INS/9:20/5A.F** PROCESSADOR INTEGRADOR DIGITAL/ANALÓGICO PARA APLICAÇÃO EM ESPECTROSCOPIA COM RESOLUÇÃO TEMPORAL. C.A. Santarine (UNESP-IPEA-Pres. Prudente/SP) e R. L. Zimmerman (F.F.C.L.-USP-Ribeirão Preto/SP).

Com finalidade de se discriminar e integrar tempos de relaxação diferentes - provenientes de uma mesma amostra luminescente, desenvolveu-se e construiu-se um dispositivo digital-analógico de baixo custo, cujo princípio de funcionamento - consiste na utilização de um circuito de engatilhamento eletrônico de tal forma que se possa ajustar uma janela de tempo na qual só o tempo de relaxação desejável possa ser caracterizado. Tal dispositivo pode ser utilizado para determinação de baixas concentrações de íons luminescentes em solução, com resultados bastante satisfatórios.

(Patrocínio CNEN - Comissão Nacional de Energia Nuclear)

**INS/9:40/5A.F** SISTEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE DADOS SCALER/MICROCOMPUTADOR

Ana Maria de Paula e Miguel Tostes Ribeiro - Departamento de Física - ICEx - UFMG

Os scaler's são equipamentos tipo contadores de pulsos elétricos. A contagem é acumulada durante um certo intervalo de tempo e apresentada no visor. Normalmente a medida é lida visualmente. Implementamos um sistema no qual o computador controla o tempo de medida, lê as contagens e limpa os registros para novas medidas. Essas funções são implementadas por uma interface que se comunica com qualquer microcomputador através de suas portas serial e com os scaler's por um barramento paralelo.

Este equipamento está sendo usado como parte de um sistema automático de medidas de intensidade em espalhamento de luz.

(ver também seção de painéis)

INS/10;15/5A.F "MAGNETOMETRIA COM FILMES FINOS DE PERMALLOY" - Ramon Valls Martín e Nei Fernandes de Oliveira Jr. - Instituto de Física da USP.

Sensores de campos magnéticos de alta sensibilidade e resolução foram desenvolvidos partindo-se de filmes finos de Permalloy (Fe-Ni). Estes filmes apresentam uma anisotropia induzida pela aplicação de um campo magnético durante sua deposição em evaporadora apropriada.

Dois famílias de sensores foram analisados:

- resistivos - (obtidos através de técnicas fotolitográficas) aproveitam a dependência da resistividade do filme com o campo aplicado.
  - indutivos - utilizam bobinas de indutâncias variável cujos núcleos são compostos pela sobreposição de vários filmes.
- Sensibilidade típica de 1 Volts/Oe e limites de detecção de  $10^{-5}$  Oe são obtidos com filmes de 700 a 2000 Å de espessura.

**INS/8:00/6A.F**

**CONSTRUÇÃO DE UM MODULADOR ACUSTO-ÓPTICO PARA CHAVEAMENTO Q.** Wagner de Rossi,  
César Eduardo Calvo Ribeiro, Spero Penna Morato e Nilson Dias Vieira Junior  
(Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

O objetivo do trabalho é o desenvolvimento de um chaveador acusto-óptico para "Q-switching" de lasers c.w. de Nd:YLF. Esse chaveador consiste em um transdutor piezocelétrico que propaga ondas acústicas num bloco de silício que intercepta o feixe dentro do resonador óptico. Essas ondas acústicas são viajantes e quando o transdutor é excitado, uma grade de fase volumétrica é formada no interior do bloco difratando o feixe para fora da região de alinhamento do laser. Assim, durante a excitação acústica o meio ativo armazena energia para, posteriormente, quando as ondas acústicas evanescerem, descarregar essa energia num pulso gigante.

Para construir esse modulador, o bloco de silício fundido tem as suas faces, que estão ao longo do feixe, formando o ângulo de Bragg para a rede de difração. Além disso, a face oposta ao transdutor está inclinada a 10° para evitar a formação de ondas acústicas estacionárias no bloco. A lâmina transdutora tem uma espessura de 1/4 de onda acústica para a frequência de 30MHz, no 3º harmônico. Pretende-se inicialmente caracterizar a resposta espectral dessa lâmina, para obter a máxima eficiência da deflexão do feixe e o maior tempo de evanescência das ondas acústicas no diâmetro do feixe.

**INS/8:20/6A.F**

**UM NOVO MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE PEQUENOS DESLOCAMENTOS ANGULARES EM FEIXES LASER.** S.M.N.Mello, Marcos Tadeu T. Pacheco (IEAv-CTA) e L.C.M. Miranda (INPE).

Foi desenvolvida uma técnica para a medida de pequenos deslocamentos angulares em feixes laser que dispensa a utilização de sensores de posição. Esta técnica se baseia no fato de que a refletividade nas faces de um prisma varia com o ângulo de incidência nas mesmas, sendo que esta variação é muito grande na região próxima ao ângulo crítico. Sendo assim, é possível relacionar a amplitude de oscilação com a variação da intensidade do feixe.

Este procedimento foi originalmente desenvolvido para se medir o efeito mirage, onde os deslocamentos angulares são da ordem de miliradianos, e possui uma vasta gama de aplicações tecnológicas tais como o monitoramento de vibração em estruturas.

**INS/8:40/6A.F**

**Medição da susceptibilidade elétrica em baixa frequência**

No literatura existe pouca informação em relação a medições da susceptibilidade elétrica em baixa frequência. Por considerarmos um assunto de interesse desenvolvemos um sistema de medida abaixo explicado.

A tensão de saída de um integrador depende da impedância do capacitor de realimentação. A medição desta tensão em amplitude e fase, com um osciloscópio de duplo feixe com memória, permite determinar a capacidade e as perdas do capacitor. Como circuito integrador está sendo usado um eletrônico para aproveitar sua alta impedância de entrada. Serão apresentados resultados experimentais

**INS/9:00/6A.F**

**MEDIDAS DE CONDUTIVIDADE ELÉTRICA COM BAIXO TEMPO DE RESPOSTA**  
Mauro Pin e Mario N. Balbich (Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul).

Tomando como base um "conditometro" por nós construído anteriormente, estamos implementando um sistema de realimentação para aumentar a precisão do mesmo e para conseguirmos diminuir o tempo requerido para estabilização e medida de variações bruscas na resistência elétrica em estudo. O aparelho acima referido utiliza detecção síncrona a baixa frequência (aprox. 27 Hz), e a realimentação é obtida utilizando um amplificador com ganho controlado por tensão. Em nosso primeiro teste de bancada obtivemos tempos de resposta (com estabilidade comparável à original) que são, pelo menos, uma ordem de grandeza menor.

**INS/9:20/6A.F**

**MONTAGEM E CARACTERIZAÇÃO DE DETETOR PIROELÉTRICO.** Antonio Carlos Hernandes e Nelson J.H. Gallo (Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo).

Monocristais de sulfato de triglicina (TGS) preparados pela técnica de abaixamento de temperatura em solução aquosa(1) foram utilizados com sucesso na montagem de um detector piroelétrico para operar na região do infravermelho do espectro eletrromagnético. O detector é composto de uma lâmina de TGS de 200 microns de espessura obtida através de clivagem perpendicular ao eixo ferroelétrico, cujo coeficiente piroelétrico na temperatura de 26°C é de  $3,2 \times 10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/V.s; um FET BF911, um resistor de carga de 101 ohms e uma janela de KBr de 600 microns de espessura. A responsividade do detector na frequência de 13,8Hz é de 3,7V/W na temperatura de 26°C e o tempo de resposta da ordem de 1mseg. Modificações estão sendo realizadas com o objetivo de aumentar a responsividade a baixa frequência e assim tornar o detector competitivo com os encontrados no mercado.

(1) Hernandes,A.C.;Gallo,N.J.H. - Anais da 38º SBPC,38(7):345,julho de 1986.

**INS/9:40/6A.F**

**LITOGRÁFIA POR FEIXE DE ELÉTRONS CONTROLADA POR COMPUTADOR**  
Sidnei Paciornik, Raul Almeida Nunes, Eduardo Gonçalves Galucio e  
Luiz Carlos Scavarda do Carmo - PUC/RJ

A utilização de feixes de elétrons na criação de defeitos em cristais ou na confecção de máscaras em materiais eletro-sensíveis se constitui em técnica relevante na produção de dispositivos integrados eletrônicos e/ou ópticos.

Neste trabalho descrevemos o desenvolvimento de um sistema de programação em microcomputador que permite transferir para uma amostra padrões geométricos gerados por um programa de Projeto Assistido por Computador (CAD) através do controle automático da seu posicionamento sob o feixe de elétrons. A amostra está presa a uma mesa de coordenadas com deslocamento XY que tem sua movimentação controlada por 2 motores de passo de 500 passos/revolução acoplados através de "cogs" duplos que minimizam problemas de alinhamento e vibração.

**INS/PAINEL** CONSTRUÇÃO DE UM FORNO RÁPIDO PARA APLICAÇÃO EM DIFUSÃO E TRATAMENTO TÉRMICO DE SEMICONDUTORES - Alexandre Seneigolo Lujan, Francisco Carlos de Prince, Emílio Carlos Bortulucci - Laboratório de Pesquisas em Dispositivos (LPD) Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP.

Fornos rápidos são de grande interesse e aplicação em processos de fabricação de semicondutores. Em geral usam lâmpadas de halogênio para aquecimento da amostra, ao contrário de um forno convencional, que usa uma resistência elétrica. Dessa forma, no forno rápido o aquecimento da amostra é feito por radiação das lâmpadas, e não por condução térmica de calor gerado por uma resistência, o que garante uma alta taxa de subida de temperatura na amostra (de ordem de um cento de graus por segundo).

No nosso projeto usamos 18 lâmpadas de halogênio, cada uma com 1000 watts de potência. As lâmpadas são dispostas em torno de um tubo de quartzo, onde é colocada a amostra.

Dois tipos de controle de temperatura serão implementados, um manual e o outro por microcomputador. O uso do microcomputador nos permitirá não só controlar a temperatura, mas a sua taxa de subida, além de tornar possível ciclos de pré-aquecimento.

As aplicações desse tipo de forno são o "annealing" rápido (de ordem de dezzenas de segundos), o que evita que ocorram difusões na amostra, e difusões rasas (de ordem de 1000A) de impurezas dopantes em semicondutores.

Este trabalho é financiado em parte pela FAPESP e TELEBRAS.

**INS/PAINEL** DISPOSITIVO DESTINADO À OBTENÇÃO DE PEQUENOS CRISTAIS ESFÉRICOS PARA USO EM CRYSTALOGRAFIA. Carlito Lariucci (Dep. Físico - Universidade Federal de Goiás) e Gerson A. Santarino (IPEA - UNESP) Presidente Prudente - SP.

Em cristalografia estrutural a forma geométrica da amostra cristalina muitas vezes é um importante fator na determinação da estrutura, uma vez que a precisão da correção de absorção e ser aplicada depende fundamentalmente deste parâmetro. Isto se justifica devido ao fato de que nas amostras com geometria irregular a resolução da estrutura torna-se praticamente impossível, pois, os métodos de correção desenvolvidos só são aplicáveis a geometrias regulares (por ex.: esféricas, cilíndricas,...).

Com a finalidade de se produzir cristais com geometria esférica, desenvolveu-se e construiu-se um dispositivo mecânico constituído de uma câmara onde a amostra é acondicionada fazendo-a girar sobre uma seção circular cujas paredes internas e base são constituídas de material abrasivo com granulação variável. A amostra é acionada por duas tomadas conectadas a câmara e estas a linha de ar comprimido seco. Com este dispositivo foram produzidas esferas com diâmetros de 0.2 a 0.5 mm, a partir de materiais de dureza variável (1 a 7.5 na escala Mohs) com resultados considerados altamente satisfatórios.

**INS/PAINEL** DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA PARA LASER ANNEALING DE Si IMPLANTADO COM As<sup>+</sup> R.A. Muribeca, UPPb, R.J. Lima, Unicamp e J.B. Nicola, Unicamp

Neste trabalho apresentaremos um sistema para Laser Annealing da superfície de Si implantado com As<sup>+</sup>, com o objetivo de recristalizar a superfície modificada pelo bombardeamento dos íons implantados. Este sistema compreende uma câmara, mantida em atmosfera de gás inerte com a amostra presa a um bloco metálico, por sucção, mediante o bombeamento aspirante de uma bomba de vácuo primário. O suporte da amostra é aquecido, por uma resistência amarrada no próprio suporte da amostra, sendo a temperatura desta controlada por um controlador de temperatura. Todo o sistema encontra-se montado numa mesa Z, e controlada por um microcomputador. Neste sistema o laser permanece parado enquanto a amostra é que movimenta. Este projeto encontra-se em fase final de acabamento.

**INS/PAINEL**

**DETECÇÃO DA RADIAÇÃO BETA EMITIDA DE AZULEJOS PINTADOS.** Linda V.E. Galdas (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Comissão Nacional de Energia Nuclear, São Paulo).

Após a constatação nos laboratórios da Kraftwerk Union (KU) em Erlangen, Alemanha, de que certos tipos de azulejos pintados, de procedência italiana, são radioativos, no presente trabalho foram utilizadas amostras termoluminescentes ultra-finas (60 nm) de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  para a determinação de taxas de dose absorvida no ar ( tanto na superfície dos azulejos como a 5cm de distância) e de fatores de transmissão para diferentes camadas equivalentes a tecido. Também, para comparação, foram determinadas as taxas de dose absorvida no ar de paredes de cimento sem revestimento de azulejos, e com revestimento de azulejos simples sem ornamentos coloridos. Nestes casos foram obtidos valores que são normalmente encontrados em materiais de construção.

**INS/PAINEL**

**INTERFACE ANALIZADOR MULTICANAL - MICROCOMPUTADOR**

Miguel Tostes Ribeiro , Ana Maria de Paula e Jyveir Contillo  
Departamento de Física - ICB - UFG - UFGC

O analisador Multicanal é uma memória intermediária para a acumulação de dados. É muito usado em Correlação de Ressonância, Espectroscopia Mossbauer, Correlação Angular e medidas de Intensidade Integrada. A saída de dados é feita normalmente em fita de papel através de um teletipo. Desenvolvemos uma interface para comando externo da unidade básica e aquisição de dados. A interface é ligada através de linha serial padrão RS 232c a qualquer microcomputador que disponha deste porta, o qual deverá gerar os comandos, armazenar e processar os dados.

(Ver também seção de painéis)

**INS/PAINEL**

**DESENVOLVIMENTO DE DOSÍMETROS FINOS DE  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  PARA DETEÇÃO DA RADIAÇÃO BETA**  
Letícia Lucena Campos e Marina Ferreira Lins. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN-SP.

O  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  é um dos materiais termoluminescentes mais sensíveis e vem sendo muito utilizado na monitoração da radiação X e gama. Para a monitoração da radiação beta a espessura do dosímetro e a energia da radiação são fatores fundamentais para a resposta do dosímetro, devido à absorção e espalhamento das partículas beta na matéria. Pastilhas termoluminescentes de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy} + \text{Teflon}$  com espessuras entre 0,10 e 0,80mm foram produzidas e testadas para detecção da radiação beta. As principais propriedades estudadas foram a reprodutibilidade, sensibilidade, dependência energética, resposta em função da dose absorvida, descimento térmico e limite mínimo de detecção.

**INS/PAINEL** MÉTODO DE ANÁLISE DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES POR CONTRASTE DE VULGACEM LM MICROSCÓPIA ELÉTRONICA DE VARREDURA. Roberto R.S. Pinto e Carlos Alberto Ribeiro - (Departamento de Física Aplicada - IFGW-DN/CAMP).

O uso da microscopia eletrônica de varredura na caracterização dos dispositivos semicondutores vem sendo aplicado em grande escala, tendo sido desenvolvido uma série de técnicas para análise. Uma das principais vantagens do uso da microscopia se deve ao fato de ser uma técnica não destrutiva. Entre estas técnicas se encontra o contraste de voltagem, que consiste em se observar o dispositivo polarizado eletricamente, permitindo desta forma observar as regiões na superfície examinada que tenham potenciais elétricos diferentes, definindo então suas dimensões e posição, etc.

Para tanto se faz necessário adaptar ao microscópio eletrônico (SEM) um sistema que permite inserir o dispositivo no mesmo com possibilidade de variar as condições de polarização deste durante seu exame sob a feixe eletrônico. Para isto está sendo desenvolvido um porta amostra que permite ter contatos elétricos com a exterior da máquina através das quais irá se controlar o dispositivo.

**INS/PAINEL** Mapeamento de Corrente em um Sistema de Corona. João Síncio de Carvalho Campos e José Alberto Ciacometti. (UNESP - Ilha Solteira e Instituto de Física e Química de São Carlos - USP - São Carlos).

O sistema de corona é composto por: uma ponta colocada no eixo de um cilindro e uma placa plana, sendo eles metálicos e isolados entre si. A ponta e o cilindro podem ser polarizados e as correntes elétricas que circulam para o terra podem ser medidas. Além disto a placa plana possui uma sonda que permite mapear a distribuição de corrente produzida pela ponta/cilindro. O objetivo deste trabalho é caracterizar eletricamente este sistema para sua aplicação na deposição de íons (produzidos pela descarga corona) sobre amostras isolantes.

São mostrados o mapeamento da corrente (collected pela sonda) em função das várias combinações entre distância ponta-placa, tensão de corona e tensão de cilindro, como também medidas das correntes de placa, cilindro e corona em função do tamanho de cilindro para os parâmetros tensão da corona e distância ponta-placa.

**INS/PAINEL** "MAGNETRON" - EVAPORAÇÃO CATÓDICA DE ALTA RAZÃO - CONSTRUÇÃO E APLICAÇÃO. Sebastião Elautério Filho, Edyverdo A. Farah e Sérgio A. B. Gilac (Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais. IFGW - Universidade Estadual de Campinas).

Foi desenvolvido um sistema de vácuo para a deposição de filmes pela técnica de evaporação catódica de alta razão. A evaporação catódica de alta razão realizada por eletrodos do tipo "magnetron", utiliza campos magnéticos gerados por imãs permanentes ou eletro-imãs. Uma das vantagens da técnica está na possibilidade de obtenção de camadas com razão de deposição de micrônas por minutos, razão esta de 100 à 1000 vezes maior que a de "sputtering" convencional. Este dispositivo permite a obtenção de materiais para a aplicação na indústria eletro-eletrônica e óptica. (FAPESP)

**A FORMAÇÃO DA IMAGEM NO MICROSCÓPIO IÔNICO DE CAMPO**  
Caio M. C. de Castilho, Instituto de Física, UFSC.

O Microscópio Iônico de Campo (Field Ion Microscope - FIM) constitui instrumento capaz de, rotineiramente, fornecer imagens de superfícies, igualmente superfícies metálicas, com resolução da ordem de 2 Å. Apesar de a variação local do campo elétrico ser aspecto básico na interpretação da formação da imagem e do contraste no FIM, discute-se como isto se manifesta - se através da concentração do gas imediatamente ou da probabilidade de ionização. Um modelo para o campo elétrico próximo da superfície do emissor foi estabelecido e, a partir daí, características operacionais do FIM; como a resolução, as "condições ótimas" de operação, a calibragem do campo na superfície do emissor, etc.; são calculadas, tendo-se assim a possibilidade de comparar a influência da concentração do gas e da taxa de ionização.

**Apoio CAPES.**

**CRISTAIS LÍQUIDOS**  
**Coord.: - John D.Gault (UFSC)**

**LIQ/8:00/4A.F** SÍNTESI E PROPRIEDADES MESOMÓRFICAS DA SÉRIE HOMOLOGA 4-n-ALCOXISALICILIDEN-4'-n-ALCOXIANILINA: Hugo Gallardo e Maria Josseline More (Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina).

No presente trabalho estuda-se o comportamento mesomórfico e sinteses de dez membros da série homologa 4-n-alcoxisaliciliden-4'-n-alcoxianilina. Medem-se suas temperaturas de transição no microscópio de luz polarizada termostatizada e propriedades termodinâmicas com análises térmicas diferencial de varredura (DSC). A presença de um grupo hidroxilo em posição orto permite a formação de uma forte ponte hidrogênio com átomo de nitrogênio responsável por a estabilização da mesofase nêmatica para os primeiros três membros da série n=1,2 e 3, a partir de n=4 ate n=8 observou-se um dimorfismo com a presença de duas mesofases, nêmatica e esmética. As temperaturas de transição S-I sobem gradualmente a medida que a curva N-I cai com o aumento da cadeia alquilica (n). A mesofase nêmatica apresenta o efeito par-impar com o aumento da cadeia alquilica e aumenta a estabilidade da mesofase esmética; assim para n=9 e 10 só observou-se a mesofase esmética. Todas as compostos sintetizado não apresentam termocromismo no estado líquido cristalino.

**LIQ/8:20/4A.F** ELETRETOS DE MEMBRANAS IÔNICAS. SYLVIO QUEZADO. Departamento de Física, CCT-UFPB(CG).

Nafion é um polímero perfluorosulfonado com estabilidade química mecânica e térmica semelhante ao Teflon.

Análise por Técnicas de Correntes Termoestimuladas revela a existência de dois picos de despolarização. O pico em torno de 373K é dependente do campo de polarização e contribui com 2/3 da polarização total que é da ordem de  $10^{-8}$  C/cm<sup>2</sup>. O segundo pico ocorre em torno de 423K e é independente do campo de polarização. Provavelmente este deve-se aos cations e aqueles às cadeias laterais existentes neste polímero.

Está em estudo a influência da água absorvida, bem como a mobilidade de cations e moléculas de H<sub>2</sub>O nestas membranas.

Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq.

**LIQ/8:40/4A.F** MEDIDAS DE SUSCETIBILIDADE COMPLEXA EM FERROFLUIDOS - Marcus B. Lacerda Santos e Fernando O. Véas Letelier - Departamento de Física - ICEx - UFG

Medidas de suscetibilidade complexa em função da frequência podem dar informações sobre mecanismos de absorção. No caso de ferrofluidos um mecanismo de baixa frequência claramente identificável seria relacionado com o tempo de reorientação das partículas que compõem o ferrofluído. Numa etapa posterior poderia se estudar o comportamento das partículas de ferrofluído como depentes em uma matriz de cristal líquido.

Estamos atualmente em fase de desenvolvimento da técnica de medida.

**LIQ/9:00/4A.F ESPALHAMENTO RAYLEIGH EM CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS - Marcus B. Lacerda**

Santos -Universidade Federal de Minas Gerais - Departamento de Física.

Esse programa visa inicialmente retomar o estudo estudo da dinâmica de flutuações termicamente excitadas nas fases nemáticas (uniuníaxial e biaxial) e isotrópica do sistema K-laurato, decanol, água, iniciado na minha tese (1),(2). A motivação principal é o modo "suplementar", isto é, o modo de flutuação lenta não previsto pelo modelo ordem-desordem puro. A hipótese de tempo de vida micelar finito invocada para explicá-lo<sup>(2)</sup> tem gerado alguma controvérsia, sem que um mecanismo alternativo tenha sido proposto. Um estudo experimental mais aprofundado fosse necessário, bem como um esforço paralelo no plano teórico. O inicio das medições está condicionado à conclusão de montagens ora em curso (prevista para julho/1987).

(1) M.B. Lacerda Santos, Y. Galerne, G. Durand, Phys. Rev. Lett. 53, 787 (1984)

(2) M.B. Lacerda Santos, G. Durand, J. de Physique 47, 529 (1986)

**LIQ/9:20/4A.F FLUTUAÇÕES MICELARES INVESTIGADAS POR ESPALHAMENTO BRILLOUIN - José Marcus**

Andrade Figueiredo e Marcus B. Lacerda Santos - Universidade Federal de Minas Gerais - Departamento de Física

Flutuações coletivas lentas, associadas ao parâmetro de ordem nemático, no sistema K-Laurato, Decanol, Água, têm sido estudados por espalhamento Rayleigh (correlação de fotonos)<sup>(1)</sup>. Uma análise da luz espalhada a frequências mais elevadas poderia dar informação sobre flutuações ao nível dos objetos individuais que constituem essas fases, isto é, micelas. Tais flutuações micelares têm sido sugeridas na literatura, dentro da concepção de micelas "maleáveis"<sup>(2)</sup>, embora não se disponha de evidência direta desta característica. Medições recentes de neutrons de alta resolução em soluções diluídas de SDS<sup>(3)</sup> foram interpretadas em termos de flutuações de forma e número de agregação de micelas. Uma estimativa crua, baseada em um modelo contínuo (a micela é assimilada a uma placa flexível) dá uma frequência característica para essas flutuações da ordem de  $10^3$ Hz. O instrumento de análise da luz indicado é o Interferômetro de Fabri-Perot. Atualmente estamos trabalhando na implantação desta técnica (Espalhamento Brillouin) juntamente com outros pesquisadores do Laboratório de Óptica do DIF-UFMG. A montagem óptica é em desenvolvimento para a experiência de Rayleigh, vindo o Brillouin alargar seu uso.

Referências:

1- M.B. Lacerda Santos, Y. Galerne, G. Durand, Phys. Rev. Lett. 53, 787 (1984).

2- Y. Hendrikx, J. Charvolin, M. Rawiso, L. Liébert, M.C. Holmap, J. Phys. Chem. 87 (1983) 3991.

3- B. Cabane, R. Duplessix, T. Zemb, J. Physique 46, (1985) 2161.

**LIQ/9:40/4A.F ESTUDO DO SISTEMA DODECIL SULFATO DE SÓDIO/ÁGUA/DECANOL. L.Q.Amaral, M.Z.N. Henriques, D.R. Bittencourt e H.Itri. Instituto de Física da Universidade de São Paulo.**

O diagrama de fase do sistema dodecil (lauril) sulfato de sódio/água/decanol foi investigado. Foram localizadas e caracterizadas por microscopia óptica e difração de raios-X fases nemáticas desse sistema. São discutidos aspectos do diagrama de fase em comparação com outros anfifílicos e resultados de difração em várias fases do sistema.

**LIQ/10:15/4A.F ESPALHAMENTO DE RAIOS X POR CRISTais LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS UNIAXIAIS.** Diomar da Rocha Santos Bittencourt e Lin Queiroz do Amaral (IFUSP).

Foram estudadas amostras de cristais líquidos nemáticos liotrópicos uniaxiais constituídos por solução de anfílico, água, decanol, com e sem adição de sal. Foram utilizados os anfílicos decilsulfato de sódio e dodecilsulfato de sódio. Foram obtidos perfis de intensidade difratada das amostras em estudo à temperatura ambiente em um difratômetro de baixo ângulo. As funções de interferência entre os objetos espalhados foram obtidas, a partir de modelos estruturais para as micelas de mesofases nemáticas uniaxiais.

**LIQ/10:35/4A.F COMPARAÇÃO DOS EFEITOS DE  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{NaCl}$  E DECANOL NAS MESOFASES DO SISTEMA CDA/ $\text{H}_2\text{O}$ .** \*Marcos Antônio Leite e +John Dale Gault (\*Colégio Estadual Anibal Nunes Pires, +Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC).

Foram elaborados diagramas de fases mostrando os efeitos de adicionar  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ,  $\text{NaCl}$  e decanol a um cristal líquido liotrópico de: cloreto de decilmônio (DACL) e água. Embora existam diferenças quantitativas, todos estes aditivos destroem a fase hexagonal (em concentrações de ordem de  $5 \times 10^{-2}$  molar) e favorecem as fases nemática e lamelar. O efeito da  $\text{NaCl}$  sobre as mesofases é maior do que  $\text{NH}_4\text{Cl}$  provavelmente devido a maior interação do  $\text{Na}^+$  com a água comparado com  $\text{NH}_4^+$ . O decanol tem um efeito maior sobre as fases nemática e lamelar do que os dois sais. (CNPq, PADCT).

**LIQ/10:35/4A.F VARIAÇÃO DOS VOLUMES PARCIAIS DE SURFACTANTE E ÁGUA NAS TRANSIÇÕES DE FASES EM SISTEMAS LIOTRÓPICOS COMPOSTOS DE CDA/ $\text{NH}_4\text{Cl}/\text{H}_2\text{O}$ .** \*John Dale Gault e +Alfredo T. Nunes Pires (\*Departamento de Física e +Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina).

Utilizando medidas precisas da densidade em sistemas de cloreto de decilmônio (CDA)+ $\text{NH}_4\text{Cl}$ + $\text{H}_2\text{O}$ , foram calculados os volumes molares aparentes do CDA e da água. Na CMC o volume de CDA aumenta 5%. Da CMC até o início da fase nemática o volume molar da água diminui cerca de 1%. Na transição de fase isotrópica-nemática, o volume de CDA aumenta 0.2%. O papel do  $\text{NH}_4\text{Cl}$  parece ser importante na determinação da densidade do sistema e experimentos para esclarecer este ponto estão em andamento. (CNPq, FINEP).

LIQ/11:15/4A.F TÉCNICA PARA MEDIDAS DE ÍNDICES DE REFRAÇÃO DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS. Ted R. Taylor, Gerson R. Duriques e Maria L. Caselani (Deptº de Física - UFSC)

Os índices de refração de cristais líquidos liotrópicos são difíceis de serem medidos devido a sua pequena anisotropia ótica. Este problema foi resolvido utilizando-se um espectrômetro-goniômetro e um sistema de aquecimento e refrigeração que funciona como um elemento termoelectrônico (Efeito Peltier).

O cristal líquido é introduzido em tubos capilares retangulares e então se lados nas extremidades com fogo e posteriormente colocado entre dois prismas de faces paralelas. A extremidade do tubo no qual incidirá a luz monocromática é selada de tal maneira que fique uma superfície altamente difusora de luz. Assim, a luz monocromática torna-se difusa, espalhando-se em todas as direções através da amostra.

(Financiado pelo FINEP, CNPq e PADCT)

LIQ/11:35/4A.F ESTUDO DE TRANSIÇÕES DE FASE UNIAXIAL-BIAXIAL EM CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS COLESTÉRICOS - MEDIDAS DE INTENSIDADE DE LUZ. Teodósio Kroin (Deptº de Física UFSC) e Antonio Martins Pigueiredo Neto (Inet. de Física - USP)

Transições de fase uniaxial-biaxial em cristais líquidos liotrópicos (C.L.L.) nemáticos tem sido extensivamente estudadas tanto teóricamente como experimentalmente, evidenciando serem estas transições de segundo orden. O objetivo deste trabalho é estudar a transição uni-biaxial em C.L.L. colestéricos, obtidos por meio de dopagem dos C.L.L. nemáticos com uma molécula ópticamente ativa, através de medidas da intensidade da luz transmitida pela amostra quando colocada entre polarizadores cruzados. Esta técnica permite a obtenção da birrefringência da mesofase, bem como mostrou um "loop" de histerese, sob aquecimento e resfriamento da amostra, que pode caracterizar a transição como de primeira ordem.

LIQ/11:55/4A.F COLESTERICIDADE INDUZIDA EM LIQUESOFASES NEMÁTICAS POR ANTFÍLICOS ÓPTICAMENTE ATIVOS - Maria Elisa Marcondes Helene (Instituto de Física da Univ. de S.Paulo)

Liquesofases colestéricicas foram preparadas a partir de mesofases nemáticas de laurato de potássio/1-decanol/H<sub>2</sub>O, tendo sido adicionado às mesmas 0,05% em peso de ferrofluído no intuito de obter-se a orientação das mesofases por campo magnético fraco (5-10G).

Os compostos indutores de colestericidade foram: A) N - lauroil - t - alani na e B) N - lauroil - t - alaninato de potássio. Quantidades crescentes de ambos os compostos foram adicionados às mesofases nemáticas (discóticas) e observadas as transições de fases em função da temperatura para cada uma das mesofases colestéricicas induzidas. A técnica usada foi microscopia óptica de luz polarizada tendo sido as amostras colocadas em microslides de 0,2mm. de espessura. Foram observadas texturas correspondentes a Ch<sub>C</sub>, Ch<sub>BK</sub>, Ch<sub>D</sub>, N<sub>D</sub>, e L<sub>a</sub>.

Os resultados compararam: 1) os diagramas da fase obtidos (temperatura x concentração) para cada indutor; 2) variação dos passos em função da concentração do indutor; 3) efeitos da interface vidro/cristal líquido x aparecimento do passo para quantidades pequenas de cada indutor.

Ch<sub>C</sub> - colestérica calamítica; Ch<sub>BK</sub> - colestérica biaxial; Ch<sub>D</sub> - colestérica discótica; N<sub>D</sub> - nemática discótica; Pol - polifásica; L<sub>a</sub> - lamelar.

L10/8:00/5A.F ESTUDO DE DIAGRAMAS DE FASE DE MESOFASES COLESTERICAS DE LAURATO DE POTÁSSIO (KL)/DECANOL (DeOH)/ÁGUA/BRUCINA(BS). N.C. Valente Lopes e Antonio M. Figueiredo Neto (Inst. Física USP)

Para a construção dos diagramas de fase será utilizada mesofases liotrópicas colestéricas  $\alpha$  dualas constituídas de laurato de potássio (KL/decanol (DeOH)/água/sulfato de brucina heptahidratado (BS) sob o campo magnético externo ( $H$ ). A primeira etapa do trabalho consiste em fazer um diagrama de fase onde observamos a temperatura e a concentração do agente quirral (BS) e identificar a mesofase colestérica com a sua faixa de temperatura em função da concentração molar ( $M_0 = [BS]/[BS] + [DeOH]/[KL]$ ). As fases e as transições de fase são caracterizadas pela textura óptica observada em microscópio óptico com luz polarizada. A amostra é colocada em um "microslide" formando assim um filme de cristal líquido de espessura 200 $\mu$ m. e colocado entre polarizadores cruzados. O campo magnético ( $H$ ) é atuando colocando os planos colestéricos perpendiculars a sua direção por fases Ch-Discô e Ch-Biaxial e a fase colestérica calamítica é desenrolada sobre a ação de  $H$ . Paralelamente ao procedimento de determinar as transições de fase faz-se a medida do passo entre os planos colestéricos para fases Ch-Discôticas e Ch-Biaxial. As etapas seguintes consistem em repetir o mesmo procedimento onde a variação da concentração da brucina será substituída pela variação da concentração do Decanol (DeOH) e do Laurano de Potássio (KL).

L10/8:20/5A.F ESTUDO COMPARATIVO DOS SISTEMAS LIOTRÓPICOS COLESTÉRICOS INTRÍNSECOS E INDUZIDOS. A.M. Figueiredo Neto, L. Liebert e T. Galerne (Instituto de Física de USP e Université Paris-Sud)

Mesofases liotrópicas colestéricas podem ser obtidas por meio do "doping" de mesofases nêmaticas com moléculas ópticamente ativas. No caso da molécula quiral ser um dos surfactantes constituintes da mesofase (álcool ou sabão), o cristal líquido colestérico obtido é chamado intrínseco e, em caso contrário, é chamado induzido. Como exemplo de sistema intrínseco temos o laurato de potássio/1-decanol/d-2-octanol/água, e induzido o laurato de potássio/1-decanol/água/sulfato de brucina heptahidratada. O sistema intrínseco apresentou a sequência de fases em função da temperatura invertida em relação ao usualmente observado em sistemas colestéricos induzidos, isto é, foi observada a fase colestérica calamítica a baixa temperatura (-5°C em algumas misturas!) e a fase colestérica discótica a altas temperaturas (+45°C). Tal fato pode estar vinculado ao tipo de acoplamento entre o agente quirral e a micela, de modo a modificar significativamente a interação intermicelar em função da temperatura.

L10/8:40/5A.F SENTIDO DE TORÇÃO EM LIOMESOFASES COLESTERICAS INDUZIDAS - T.M.H. do Aldo, M.R. Alcantara, A.M.G. Pereira & J.A. Vanin (Inst. de Química - Universidade de São Paulo)

O sentido de torção de liomesofases colestéricas preparadas a partir de novos indutores foi determinado. Estudaram-se sistemas liotrópicos do tipo II, baseados em decilsulfato de sódio (SDS), cloreto de decilamônio(CDA) e laurato de potássio (LK). Os referidos indutores foram a D-ribose, a D-glucose, a sacarose e o D-gluconato de sódio, além dos dois enantiômeros do 2-octanol. As texturas observadas nas diferentes amostras, após orientação paralela ao campo magnético, foram homotrópicas, em alguns casos com defeitos. Em orientação perpendicular, constatou-se campo claro, de coloração uniforme, sem extinção, com alguns defeitos filamentosos. Os métodos de determinação de helicidade foram os de cunha e de De Vries. Os indutores D-ribose e D-glucose deram origem a mesofases levotorcidas, em todas as amostras observadas. D-gluconato de sódio formou mesofases levotorcidas em CDA e LK. Sacarose forneceu sempre mesofases destrotorcidas. Os indutores D-ribose, D-glucose, D-gluconato de sódio e sacarose são hidrofílicos e se distribuem entre a dupla camada elétrica das micelas e a porção aquosa. A incorporação dos enantiômeros do 2-octanol em mesofases de SDS (fração molar 0,2%), mostrou que o isômero D induz levotorção, enquanto que o L, destrotorção. Estes resultados sugerem a sistematização dos efeitos de indução, relacionando as características das moléculas indutoras com as da micela liotrópica. (FAPESP, CNPq, FINEP)

LIQ/9:00/SA.F

O EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE CENTROS QUIRAIS SOBRE O PODER ROTATÓRIO DE LIGOMESOFASES COLESTERÍCAS INDUZIDAS - T.M.H. do Aido, M.R. Alcantara, A.M.G. Pereira & J.A. Venin (Inst. de Química - Universidade de São Paulo)

Ligomesofases a base de Laurato de Potássio (LK), Decilsulfato de Sódio (SDS) e Cloreto de Decilaumônio(CDA), induzidas por sorbose, se caracterizam por ser levorotatórias de passo longo. A variação do poder rotatório com o comprimento de onda da luz incidente, permite construir o gráfico de De Vries (ângulo de rotação x inverso do quadrado do comprimento de onda), cujo coeficiente angular este é relacionado ao passo colesterolíco e à birrefringência da amostra. Uma correlação entre o coeficiente angular ( $m$ ) do gráfico de De Vries e a quantidade de centros quirais existentes na mesofase foi observada. A referida quantidade foi expressa segundo um quociente ( $f$ ) que pondera a fração molar de indutor em relação ao balanço hidrofílico/hidrofóbico dos diferentes sistemas (também em frações molares). A relação linear verificada entre  $m$  e  $f$  mostra que o poder rotatório tem dependência direta com o número de centros quirais por micela e sugere uma independência com a natureza do anfifílico empregado, desde que o tipo de interação entre o indutor e a dupla casca elétrica sejam semelhantes. Estas observações estão sendo estendidas a outros sistemas lítotrópicos colesterolícos. (CNPq, FAPESP)

LIQ/9:20/SA.F

ORIENTAÇÃO DE CRISTAIS LIQUIDOS LÍGOTRÓPICOS COLESTERÍCOS TIPO II NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS - T.M.H. do Aido, M.R. Alcantara, A.M.G. Pereira & J.A. Venin (Inst. de Química - Universidade de São Paulo)

Verificou-se distorção da textura chevron, associada à interação com paredes em celas de espessura crítica em relação ao passo colesterolíco. Ligomesofases, acondicionadas em celas planas de 200 e 300  $\mu\text{m}$  de espessura, se basearam nos seguintes sistemas: CDA/DGE (diacetona-2-ceto-gulonato de potássio), CDA/L-LAK (L-N-lauroil-alaninato de potássio), LK/colesterol, CDA/colesterol (sistemas induzidos) e L ou D-LAK (colesterolicos intrínsecos). Amostras orientadas por campo magnético, cujos arranjos colesterolícos tinham dimensões muito menores que a espessura da cela, exibiram o padrão chevron característico, em todos os porta-amostras empregados, correspondendo sempre ao mesmo valor de passo. Em condições análogas, amostras de passo grande em relação à espessura da cela mostraram textura homeotrópica, com sinal óptico uniaxial descentrado. Na situação intermediária, as amostras exibiram chevron bem característico na cela mais espessa. Na cela de 200  $\mu\text{m}$ , observou-se texturas distorcidas com o aparecimento de regiões homeotrópicas. Estas, em algumas amostras, ocuparam grandes extensões, correspondendo ao desarrolamento parcial do arranjo helicoidal. (FAPESP, CNPq, FINEP)

LIQ/9:40/SA.F

USO DE N-LAUROIL-ALANINATO DE POTASSIO COMO INDUTOR DE COLESTERICIDADE EM LIGOMESOFASES - A.M.G. Pereira, T.M.H. do Aido, M.R. Alcantara & J.A. Venin (Inst. de Química - Universidade de São Paulo)

Ligomesofases colesterolícas foram induzidas pelos enantiômeros de N-Lauroil-Alaninato de Potássio (LAK). Os anfifílicos usados foram: cloreto de decilaumônio (CDA), decilsulfato de sódio (SDS) e laurato de potássio (LK). Foi possível preparar mesofases colesterolícas do tipo II, incorporando-se de 0,12 a 0,31 X, em fração molar, de D ou L-LAK. As dimensões do passo colesterolíco, em amostras orientadas, dependem do anfifílico. Em sistemas baseados em SDS, observou-se textura chevron, correspondente a um passo de ca. 20  $\mu\text{m}$ . Em orientação semelhante, sistemas à base de CDA mostraram passo de ordem de 80  $\mu\text{m}$ . A helicidade induzida nas mesofases pelo D-LAK é destrotorcida em SDS e LK, e levotorcida em CDA. Efeitos correspondentes de indução são observados com L-LAK. A mudança de helicidade induzida pelo mesmo enantiômero pode ser racionalizada em termos de mudança da carga da cabeça iônica do anfifílico. Mesofases colesterolícas do tipo I foram preparadas com D-LAK/SDS e L-LAK/LK. As texturas observadas, em amostras previamente orientadas, correspondem aquelas já por nós descritas em sistemas semelhantes. Uma característica marcante destes sistemas do tipo I é a birrefringência extremamente baixa, menor que 0,0005. (FAPESP, CNPq, FINEP)

**MAGNETISMO**

**Coord.: - Carlos C. Becerra (IFUSP)**

MAG/8:00/4A.F POLARITONS MAGNÉTICOS EM UM FILME ANTIFERROMAGNÉTICO  
M.A.AMATO E F.A.OLIVEIRA -DEPARTAMENTO DE FÍSICA - UNIVERSIDA  
DE DE BRASÍLIA -70910 BRASÍLIA DF

Recentemente(1-3), a discussão de modos retardados(polaritons) em geometrias finitas foi retomada de modo a incluir novos tipos de excitações(2) e discutir região de existência dos modos magnéticos de um filme tipo  $MnF_2$ . Neste trabalho determinamos tais regiões, relações de dispersão e densidade de energia para esses modos.

1.N.P.Lima e F.A.Oliveira J.Phys.C:Solid St. Phys.19,5381(1986)

2.N.Raj e D.R.Tilley Solid St.Comm.55,373(1985)

3.F.A.Oliveira,N.P.Lima e A.R.dos Santos submetido a publica  
ção.

MAG/8:20/4A.F CORREÇÕES LOCAIS AO CAMPO DIPOLAR EM FERROMAGNETOS. M.V. Tovar  
Costa, S. Selzer e N. Majlis (Instituto de Física da Universidade Federal Flumi-  
nense).

As interações dipolares(elétricas ou magnéticas)geram, como é sabido, um campo local que, para sistemas macroscópicos, depende da forma da amostra. Usualmente, são consideradas amostras com formas geométricas com simetria suficiente para garantir que o campo local seja homogêneo no interior. Contudo, certas suposições feitas para o cálculo do campo local homogêneo são inválidas perto da superfície. Consideramos, para sistemas semi-infinitos, ou filmes, um método para se obter a variação do campo local com a distância à superfície. A combinação deste método com a técnica das funções de Green permitirá obter pela primeira vez soluções autoconsistentes para o campo local inhomogêneo superficial.

MAG/8:40/4A.F EFEITOS SUPERFICIAIS DA INTERAÇÃO DIPOLAR MAGNÉTICA EM FERROMAGNE-  
TOS. M.V. Tovar Costa, N. Majlis e S. Selzer (Instituto de Física da Universidade  
Federal Fluminense).

Estudamos a dependência da magnetização e da relação de dispersão dos magnons, com a distância à superfície em um ferromagneto semi-infinito. Consideramos que entre os spins existem simultaneamente a interação de troca de Heisenberg entre prótons vizinhos e dipolar magnética clássica. Mediante o método da função de Green podemos obter soluções autoconsistentes aproximadas (na RPA) para a magnetização em cada plano, em função da temperatura e da orientação da magnetização em relação à direção normal à superfície. A anisotropia das interações dipolares enriquece notavelmente as propriedades, tanto do estado fundamental como das diversas fases estáveis a temperatura finita. Discutem-se as diversas possibilidades de reconstrução superficial magnética que resultam.

**MAG/9:00/AA.F** MAGNETIZAÇÃO NO ANTIFERROMAGNETO DILUIIDO  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  EM CAMPOS INTENSOS : PROPRIEDADES DEPENDENTES DA HISTÓRIA. Frederico C. Montenegro, Sergio M. Resende e Mauricio O. Coutinho-Filho, Departamento de Física - UFPB, 50.000 Recife-PE.

Medidas de magnetização foram realizadas no antiferromagneto diluído  $Fe_xZn_{1-x}F_2$ , para diferentes concentrações de íons magnéticos:  $x=1; 0,69; 0,46; 0,25$ . Utilizamos um magnetômetro de Amostra Vibrante (PAR) adaptado a um Magneto supercondutor capaz de gerar campos magnéticos até 75K, na faixa de temperatura  $4,2K < T < 100K$ , com um controle  $\Delta T=20mK$ . Nas amostras com concentrações intermediárias observamos efeitos de campo magnético aleatório. Para a amostra de baixa concentração ( $x=0,25$ ) é visto um comportamento peculiar, típico de um vítreo de spin.

A família dos fluoretos de metais de transição como :  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  e  $Mn_xZn_{1-x}F_2$ , vem se constituindo como um dos sistemas padrões para estudo do problema do campo magnético aleatório em modelos Ising (RFIM) nos antiferromagnéticos diluídos em campo uniforme (DAPP), experimentalmente realizáveis. Nossas medidas exploram principalmente propriedades dependentes da história, como histerese no campo e na temperatura, metastabilidades e dependências temporais nas magnetizações das amostras. E encontrada uma substancial diferença de comportamento da magnetização entre os ciclos "canônicos" ZFC (resfriamento a campo nulo) e FC (resfriamento em campo aplicado), notadamente nas amostras com baixa concentração de íons magnéticos em baixas temperaturas.

**MAG/9:20/AA.F** MAGNETIZAÇÃO DE CLUSTERS DE Fe NO ALUMINATO DE LÍTIO E FERRO - J.H. Neto, P.H. Domingues, H.S. Amorim, F.de S. Barros - Instituto de Física - UFRJ e H.Guillet-Laboratoire Louis Neel, CNRS-USMNC, Grenoble.

Isotermas magnéticas de aluminato de lítio e ferro ( $LiAl_{3-x}Fe_xO_8$ ,  $x \leq 1$ ) em campos magnéticos aplicados de até 150 kOe mostram a existência de clusters de Fe com interação antiferromagnética e aleatoriamente diluídos. Considerando uma aproximação de campo molecular é proposta uma lei do tipo Curie-Weiss modificada  $\chi=C/(T-\delta(T))$ , onde a "constante de Weiss" é função de temperatura ( $T$ ), do número de íons em aglomerados magnéticos ( $x_g$ ) e da constante de Weiss ( $\theta$ ) do sistema magnético puro ( $LiFe_5O_8$ ), de forma  $\delta(T)=x_g\theta T/(0(x-x_g)-xT)$ .

**MAG/9:40/AA.F** ESTUDO EXPERIMENTAL DA FRONTEIRA DE FASE ANTIFERROMAGNÉTICA PROXIMO A  $T_c$  NOS COMPOSTOS  $Mn(Sr_{1-x}Ca_x)_2 \cdot 4H_2O$  Vençpbai,C.H.; Becerra,C.C. e Paduan Filho,A. - (I.F.U.S.P.).

Usando a técnica de medidas de susceptibilidade magnética a baixas temperaturas estamos detalhando a fronteira antiferro - paramagnética nos compostos acima. O objetivo é entender o comportamento desta fronteira com a concentração  $x$  e a possível influência que os campos aleatórios tenham sobre a mesma.

MAG/10:15/4A.F

## EVIDENCIA DE ORDEM DE CURTO ALCANCE EM LIGAS INVAR FeNi INDUZIDA POR ALTA PRESSÃO

M.R. Gallas, A. Vasques, L. Amaral, J.A.H. da Jornada  
(Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre)

Com o objetivo de estudar a ordenação<sup>57</sup> das ligas FeNi, investigamos o efeito de alta pressão no espectro Mössbauer de <sup>57</sup>Fe em ligas FeNi sujeitas a recobrimentos por longos períodos de tempo. As ligas estudadas estão na região Invar com concentrações de 30, 32,5 e 35 at% de Ni. Os tratamentos térmicos consistiram num resfriamento a partir de 1000°C em pressão de 60 kbar e à pressão ambiente. A taxa de resfriamento foi de -125°C/dia.

Comparando-se os espectros das ligas submetidas a estes dois tratamentos, observou-se nas amostras tratadas com pressão, um aumento no campo hiperfino, que pode ser explicado por um aumento na temperatura de Curie e/ou um aumento no momento magnético. Em estudos de difração de neutrons envolvendo diferentes tratamentos térmicos, nota-se um aumento no campo hiperfino com o parâmetro de ordem de curto alcance. Nossos resultados sugerem então, que altas pressões tendem a aumentar a ordem de curto alcance nestas ligas e eventualmente, induzir uma ordem de longo alcance.

MAG/10:35/4A.F

## OBSERVACAO DE TRANSICOES ENTRE AS DIRECOES DE MAGNETIZACAO (001).{010} E {100} EM FERRO-SILICIO COM TEXTURA (110) (001). ATRAVES DE ESPECTROSCOPIA BARKHAUSEN

Ruben L. Sommer, João E. Schmidt e Flávio P. Livi

Instituto de Física da UFRGS

Foi estudado o comportamento da ocorrência de descontinuidades na Magnetização (Efeito Barkhausen) em amostras de Fe-Si AISI-M5 em função do campo aplicado, para vários ângulos entre a direção (001) e o campo aplicado.

MAG/10:55/4A.F

## IMÃS PERMANENTES DE TR-Fe-B com (BH)<sub>max</sub> = 15MGOe.

Frank P. Misselli e Sergio A. Romero, Instituto de Física - USP.  
Fernando J.G. Landgraf e Daniel Rodrigues, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A.

Imãs permanentes baseados em terras raras (TR) apresentam produtos energéticos (BH)<sub>max</sub> elevados e são componentes vitais em motores e dispositivos eletrônicos.

O nosso programa de desenvolvimento da tecnologia de fabricação de imãs permanentes de Nd-Fe-B utiliza técnicas de metalurgia do pó. Partindo de uma liga com composição (Nd<sub>86</sub>Dy<sub>14</sub>) (Fe<sub>92</sub>B<sub>8</sub>), produzimos imãs isotrópicos com campos coercitivos intrínsecos  $H_{ci} > 10$ kOe. Imãs anisotrópicos foram produzidos alinhando o pó com um campo magnético. O melhor resultado obtido corresponde a um produto energético (BH)<sub>max</sub> > 15 MGOe. O processo de fabricação de imãs permanentes por metalurgia do pó será apresentado com resultados recentes.

Projeto patrocinado por : FINEP (FAPESP), FAPESP e CNPq.

**MAG/11;15/4A.F DETERMINAÇÃO DO GRAU DE ALINHAMENTO DOS GRÃOS DE IMÃS PERMANENTES DE Nd-Fe-B UTILIZANDO RAIÓ-X.**  
Valquiria Villas Boas Gomes e Frank P.Missell, Instituto de Física - USP.

O composto  $Nd_2Fe_{14}D$  devido à sua excepcional anisotropia uniaxial permite a fabricação de imãs permanentes com altos campo coercivo  $H_c$  e produto energético  $(BH)_{max}$ . A qualidade do imã depende diretamente do grau de alinhamento das partículas do imã. Os valores do produto energético  $(BH)_{max}$  e da indução remanente  $B_r$  são diretamente dependentes do grau de alinhamento dos monocristais. O conhecimento do grau de alinhamento nos permite comparar o valor do momento de saturação  $M_s$  de um monocristal com o valor de  $M_s$  para um imã permanente.

Apresentamos um método introduzido por Givord et al. que determina o valor médio desse grau de alinhamento. Esse método envolve um estudo quantitativo da distribuição estatística do alinhamento dos grãos, que é obtido da análise dos difratogramas de raio-X. Nele fazemos a comparação das intensidades das reflexões de Bragg, para diferentes valores de linhas  $[hkl]$  com respeito ao único eixo cristalográfico do imã.

O grau de alinhamento obtido em imãs NEONAX 35, fabricados por SUMITOMO, foi  $\alpha = 240 \pm 30^\circ$  que concorda com os valores obtidos em medidas utilizando a técnica de Bitter realizadas em nosso laboratório, bem como os resultados obtidos por Givord et al. e Durst et al.

Patrocinadores: FAPESP, FINEP, CNPq.

**MAG/11;35/4A.F "VISCOSIDADE MAGNÉTICA EM IMÃS DE Nd-Fe-B". João Carlos Gil Maretz e Frank P. Missell - Instituto de Física - USP.**

Viscosidade magnética é o nome dado à mudança nas propriedades magnéticas de um sistema ao longo do tempo  $t$ , logo depois que mudamos o seu estado magnético. Para amostras de Nd-Fe-B verificamos a variação da magnetização obedece à Lei  $\delta I = S \ln(t) + Cte$ , onde  $S = X_{irr} kT/q$  sendo  $X_{irr}$  a susceptibilidade irreversível e  $q$  constante com relação ao campo aplicado  $H$ .

Vamos apresentar na nossa comunicação uma revisão da teoria, baseada no princípio de ativação térmica, bem como um conjunto completo de dados tomados a  $T = 298K$ . Esses dados se compõe de medidas de  $S$  e da susceptibilidade para valores de campo aplicado  $\mu_0 H$  entre  $-2T$  e  $0T$ . Como resultado final obtivemos que  $kT/q = (8.3 - 0.3) \times 10^{-10} T$  à temperatura ambiente. Esse resultado é compatível com o obtido por K.D.Durst e H.Kronmüller do Max-Planck-Institut.

Trabalho patrocinado pela FAPESP e FINEP (PADCT).

MAG/8:00/5A.F

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FERRITAS DELUIDAS. F.H.Domingues, J.H.  
Neto e E. Nunes-Instituto de Física-UFLA.

Ferritas e meta-ferritas de lítio e sódio, e magnetita com sódio são preparadas com vários graus de diluição pela substituição do íon magnético por Al ou Ga ou pela dosagem de metal alcalino. São obtidos sistemas de balas simétricas (planares), quanto à estrutura do íon magnético, que permitem estudos das interações antiferromagnéticas Fe-Fe de clusters aleatoriamente diluídos. Estudos dos mecanismos de corrosão i aço - ferrita (magnetita) - goetita e ourofa são também objeto de investigação.

MAG/8:20/5A.F

ESTUDO DE ALMANDINAS NATURAIS POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER. José  
Carlos Parente de Oliveira (Departamento de Física - UFC) e Adalberto Vasquez  
(Instituto de Física - UFGC).

Como parte integrante de um trabalho sobre silicatos naturais apresentamos o estudo experimental, por espectroscopia Mössbauer, de duas amostras naturais da solução-sólida Firopo-Almandina ( $\text{Fe}^{x}\text{Mg}_{1-x}\text{Al}_x(\text{SiO}_4)_3$ ) com  $x=1$  e  $x=0,4$ . Estes resultados são comparados aos de uma amostra natural da solução-sólida com  $x=0,8$ .

Dos espectros obtidos e ajustes efetuados a dependência dos parâmetros Mössbauer com a temperatura é analisada: o desdobramento quadrupolar é independente da temperatura, enquanto ocorre um progressivo ordenamento magnético para temperaturas abaixo de 8K. Também observa-se que o ordenamento magnético da solução-sólida, em baixas temperaturas, varia com a concentração  $x$  de  $\text{Fe}^{2+}$ .

MAG/8:40/5A.F

DINÂMICA CAÓTICA DE ONDAS DE SPIN : EXPERIÊNCIAS COM YIG. Flávio  
M. de Aguiar, Antonio Azevedo e Sergio M. Rezende. Departamento de Física, Uni-  
versidade Federal de Pernambuco.

Bifurcações e caos em ondas de spin excitadas por microondas (-10GHz) têm sido investigados por bombeamento paralelo [1] e no processo de Suhl de segunda ordem [2]. Experiências recentes em nosso laboratório mostraram que este comportamento também ocorre no processo de Suhl de primeira ordem. Atualmente estamos tentando observar o espalhamento inelástico de luz ( $\lambda=6328\text{\AA}$ ) por magnons excitados por bombeamento paralelo. Esta técnica permite um estudo da variação da população de ondas de spin com vetores de onda específicos em função do campo de bombeamento [3]. Nesses experimentos usamos amostras de YIG ("Yttrium Iron Garnet" -  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ ), um ferromagneto protótipo.

- [1] F.M. de Aguiar and S.M. Rezende, Phys. Rev. Lett. 56, 1070 (1986).
- [2] G. Gibson and C. Jeffries, Phys. Rev. A 29, 811 (1984); S.M. Rezende, O.P.A. Bonfim and F.M. de Aguiar, Phys. Rev. B 33, 5153 (1986); H. Suhl and X.Y. Zhang, Phys. Rev. Lett. 57, 1480 (1986).
- [3] W. Wetting, W.D. Wilber, P. Kabos and C.E. Patton, Phys. Rev. Lett. 51, 1680 (1983).

MAG/9:00/3A.F EPR DO ION  $\text{Fe}^{3+}$  E  $\text{Nb}^{4+}$  EM  $\text{LiNbO}_3$ . J. P. Andreatta, O. R. Nascimento, Luis Henrique P. de Godoy e M. C. Terrile. Instituto de Física e Química de São Carlos - USP, Caixa Postal 369, 13560 - São Carlos, SP

O  $\text{LiNbO}_3$  é um material ferroelétrico muito interessante pelas suas propriedades físicas e possibilidades de aplicações práticas. Uma dessas propriedades, a mudança do índice de refração induzida ópticamente, é um efeito indesejado para algumas aplicações (ótica integrada) e conveniente para outras (holografia). Esse fenômeno é atribuído à perda de elétrons foto excitados na região iluminada. Estudamos o efeito da luz sobre o espectro de EPR do  $\text{LiNbO}_3$ , orientado, não estequiométrico, crescido em nosso Laboratório. Mesmo sendo nominalmente puro, o espectro de EPR mostra a presença de  $\text{Fe}^{3+}$ . Irradiando com luz de um laser de He-Ne (2 mW) dentro da cavidade de microondas, pudemos obter a dependência do crescimento da intensidade do sinal do  $\text{Fe}^{3+}$  com o tempo de irradiação. Verificamos também a formação de  $\text{Nb}^{4+}$ , porém só qualitativamente.

**CIÊNCIA DOS MATERIAIS/PROPRIEDADES MECÂNICAS**  
**Coord.: - Gilberto de M. Guanberto (UNICAMP)**

**MAT/3:00/4A.F** MORFOLOGIA DE UMA MISTURA POLÍMERO-METAL. R. Parisassi, R.P. Mota  
A. Vilche e M. A. R. da Moraes (Departamento de Física Aplicada, IFGW - Universidade  
do Estado de Campinas).

Serão descritas técnicas de obtenção de filmes finos por deposição à vácuo, de uma mistura polímero e metal. Foram utilizados dois metais distintos: cobre e paládio. No primeiro caso, o metal foi incorporado ao polímero por um processo de "sputtering", com a concomitante polimerização de acetileno, através de uma descarga elétrica de corrente contínua no vapor do monômero correspondente. No caso do paládio, sua incorporação se dá por sublimação térmica, simultaneamente à polimerização do acetileno em descarga de rádio-frequência. Resultados relativos à morfologia da mistura foram evidenciados por microscopia eletrônica de transmissão. Observou-se a presença de ilhas metálicas dispersas na matriz do polímero, em ambos os casos. (FINEP, FAPESP)

**MAT/8:20/4A.F** EFEITO DA RADIAÇÃO UV EM FILMES DE TEFLON FEP \*\*

Makoto Yoshida Universidade Federal do Amazonas  
Helder M. da Cunha Universidade Federal do Piauí  
Rene A. Moreira Alvaro IGCE - UNESP - Campus de Rio Claro

Amostras de Teflón FEP carregadas com descarga corona e irradiadas com luz UV pegam a sua capacidade de reter cargas elétricas a temperaturas acima de 150 °C. Esse comportamento não é observado, de forma tão acentuada, em amostras não irradiadas previamente. Não foi observada fotocondutividade UV à temperatura ambiente. Nas experiências preliminares foi utilizada uma fonte de luz de Xe, a intensidade de luz sobre a amostra foi de 13.5 mW/cm<sup>2</sup>. O efeito não acontece se uma lâmina de vidro comum é interposta entre a fonte de luz e a amostra. Os resultados poderão ser interpretados supondo alterações na interface do contato de alumínio ou por alterações nos parâmetros das armadilhas: frequência de escape e energia de ativação.

\*\* A pesquisa está sendo realizada no Instituto de Física e Química de São Carlos - USP no grupo de Elétratos.

**MAT/8:40/4A.F** CONSTRUÇÃO E APLICAÇÃO DE UMA CÂMARA DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X, A QUINTA, PARA O ESTUDO DA REAÇÃO ENTRE Nb-Ti e N<sub>2</sub>. Silvio Rainho Teixeira - UNESP  
Prus. Prudente-SP; José do A. Rodrigues - UFSCar - DEMa - São Carlos-SP; Yvonne P. Mascarenhas - IFQSC-USP-São Carlos-SP;

Com o objetivo de se estudar, do ponto de vista estrutural, a reação entre a liga Nb-Ti e o gás nitrogênio, In Situ, foi construída uma câmara de alta temperatura para o difratômetro de raios-x da UNESP - Presidente Prudente. Como a reação entre o gás e o metal provoca alteração nos parâmetros de rede, formação de solução sólida, e o aparecimento de novos picos de difração, devido a precipitação de novas fases, conclui-se que ao utilizando dessa técnica juntamente com uma câmara de alta temperatura poderá-se obter informações sobre as mudanças estruturais que ocorrem com o metal dentro de uma câmara de reação entre gases e metais. Além disso, em alta temperatura é possível acompanhar dinamicamente tais reações obtendo-se parâmetros da cinética de reação.

MAT/9:00/4A.F

**DESENVOLVIMENTO DE UM RESERVATÓRIO DE HIDROGÊNIO.** Germano Woehl Jr. e Ivo de Castro Oliveira. Instituto de Estudos Avançados/CTA- São José dos Campos-SP.

São diversas as aplicações tecnológicas de reservatórios de hidrogênio. Uma das aplicações é manter em equilíbrio a pressão de hidrogênio molecular em "thyatrons", uma válvula a gás, empregada no chaveamento de circuitos eletrônicos de alta potência e alta taxa de repetição. Com esta finalidade estamos desenvolvendo um reservatório de hidreto de titânio. Este material apresenta uma estrutura intermediária entre um composto químico e uma solução sólida, pois uma dada massa do metal é capaz de absorver uma quantidade de hidrogênio acima do máximo correspondente a fórmula química usual  $TiH_2$ . A propriedade importante do hidreto de titânio, na sua utilização em "thyatrons", é a dependência da pressão de equilíbrio do gás hidrogênio com a temperatura. Mostramos esta dependência nos reservatórios desenvolvidos. Também serão apresentados os processos utilizados no desenvolvimento desses reservatórios.

MAT/9:20/4A.F

**"PROCESSO DE FOTOGRAVAÇÃO DE LINHAS EM  $Si_3N_4$ ".** - E.L.Carpi, A.L.Gobbi, R.B.Martins - CPqD-TELEBRÁS .

O objetivo deste trabalho é otimizar o processo para a obtenção de linhas fotogravadas utilizadas na fabricação de dispositivos semicondutores.

O processo consiste na deposição de um fotoresistido sobre um filme de nitreto de silício depositado por PECVD, sobre InP ou uma de suas ligas. A amostra é exposta à diferentes doses de radiação ultra-violeta e em seguida é revelada em diferentes tempos. A influência destes parâmetros na definição das linhas será analisada. A transferência do padrão geométrico para a superfície do cristal é feita removendo-se o  $Si_3N_4$  por "plasma etching" com diferentes potências e tempos de ataque.

MAT/9:40/4A.F

**OTIMIZAÇÃO DE CABOS SUPERCONDUTORES DE  $Nb_3Sn$  OBTIDOS PELO MÉTODO DA DIFUSÃO LÍQUIDA.**

Durval Rodrigues Jr., Daltro Garcia Finatti - UNICAMP, Instituto de Física

Neste método o Nb, Sn73Cu e Cu são mantidos no estado puro durante todo o processo de fabricação sem qualquer tratamento térmico intermediário e a obtenção do  $Nb_3Sn$  é feita após o enrolamento dos magnetos por difusão à temperaturas médias - 690°C. O processo de difusão líquida tem dado as maiores correntes críticas e o entendimento dos mecanismos de aprisionamento de vorticices se faz necessário levando-se ao estudo das teorias: clássica de Hampshire e Taylor, microscópica de Larkin-Ovchinnikov, coletiva de Brandt-Larkin-Ovchinnikov e teoria de aprisionamento nas superfícies dos contornos de grãos de  $Nb_3Sn$  de G. Zerweck. Aplicando-se essas teorias será feito o cálculo das forças de "pinning" no  $Nb_3Sn$  com parâmetros finais sendo utilizados na simulação por computadores e na otimização das temperaturas de formação do  $Nb_3Sn$ .

**MAT/10:15/4A.F** ESTUDO DO DIAGRAMA Fe-Nb - José Miguel Zaleya e Sérgio Gama - Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais - Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Universidade Estadual de Campinas.

O diagrama de fase Fe-Nb é estudado experimentalmente usando a técnica metalográfica de identificação de fases, e fazendo análises químicas, além de alguns estudos complementares como D.T.A. São preparados pargas de difusão FeNb e tratados térmicamente a temperatura de 800, 1000, 1200 e 1300°C. Também são preparadas ligas em algumas composições específicas que contemplam a existência de alguma fase intermediária. Os resultados dos pargas de difusão, tanto das análises óticas, como de análises de microsonda eletrônica complementados por análises D.T.A., corroboram a existência de uma fase de composição  $Fe_2Nb$  nessas temperaturas. A fase  $Fe_2Nb_{19}$  pode ter uma faixa de temperatura estrita, de acordo com resultados. A presença da fase J ( $Fe_2Nb_3$ ) é duvidosa a baixas temperaturas. A existência da fase  $\gamma$  ( $Fe_xNb_y$ ) não está plenamente estabelecida ainda, apesar de ter-se indícios concretos sobre a existência desta fase a altas temperaturas.

**MAT/10:35/4A.F** EFEITO TEXTURA NO ESPECTRO MÖSSBAUER DE  $Na_3Fe^{II}_3$  (CN), NB,  $\beta$ H<sub>2</sub>O. J.H. de Araújo, K.A.B. de Araújo e P.P.T. de Araújo - Depto de Física-UFGM.

Para uma fonte de uma única linha e um absorvedor com uma interação quadrupolar, o espetro Mössbauer consiste de duas linhas  $\nu$  e  $\sigma$ , as quais geralmente têm, no caso de um absorvedor policristalino, a mesma intensidade. No entanto existem casos nos quais o absorvedor polí-crystalino mostra uma direção preferencial implicando numa assimetria das linhas  $\nu$  e  $\sigma$ . Isto advém de forma não esférica das partículas que compõem a amostra, que podem ser alongadas (aguilhas) ou achatadas (placas), e a ordem orientacional decorre então do alinhamento das partículas em torno de uma direção média como ocorre com palitos numa caixa. Fazendo uso desta ordem orientacional (efeito textura), procura-se inferir a respeito do sinal do gradiente do campo elétrico presente no núcleo de Fe. Para isto adota-se um modelo onde admite-se que o gradiente do campo elétrico tem uma distribuição cônica. A partir deste modelo obtém-se curvas teóricas para a dependência da razão das intensidades das linhas  $\nu$  e  $\sigma$  em função do ângulo  $\delta$ , entre a normal do plano da amostra e a radiação  $\gamma$ . Comparação entre resultados experimentais e teóricos mostram uma excelente concordância para o caso onde considera-se o gradiente de campo positivo, enquanto no caso negativo os resultados divergem.

**MAT/10:55/4A.F** TRANSFORMAÇÃO DE FASE EM CERÂMICAS SOB ALTAS PRESSÕES

A.S. Pereira e J.A.H. da Jornada  
(Instituto de Física da UFRGS - Porto Alegre - RS)

Está sendo realizado um estudo sobre a influência de defeitos na transformação de fase estrutural monoclinica/ortorrômbica que a zircônia ( $ZrO_3$ ) sofre sob pressão. A pressão necessária é gerada por uma câmara de alta pressão do tipo bigorna de diamante. A transformação é detectada pela observação com microscópio usando luz polarizada e a pressão é medida pela técnica de fluorescência do rubi.

As amostras (monocristais) foram sujeitas a diferentes tratamentos: recocimento térmico, irradiação com raios gama, irradiação com elétrons e microindentação. Os resultados até agora parecem indicar uma importância relevante de campos de tensões como centros nucleadores e não deixam transparecer um papel marcante de movimentos de deslocações no processo de nucleação. Esses são pontos básicos nos dois principais modelos existentes para o mecanismo de transformação e, portanto, nossos resultados são importantes para a compreensão dessa transformação, que é crucial na produção de materiais cerâmicos avançados.

MAT/11.15/4A.F | CERÂNICAS PIEZOLETRICAS DE TITANATO-ZIRCONATO DE CHUMBO (PZT): PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO. Bruno A. Menegazzo, Duccinei Garcia, Maria Virginia Gelfuso, José Antonio Zirras, José Alberto R. Jordao (Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos-SP).

As cerâmicas piezoeletricas de Zirconato-Titanato de Chumbo (PZT) possuem uma estrutura do tipo perovskita e são as mais utilizadas, atualmente, em aplicações tecnológicas, devido ao seu alto fator de acoplamento eletromecânico  $k^2$  (razão entre a energia elétrica convertida em energia mecânica e vice-versa) e sua alta temperatura de Curie (acima de 350°C). Soluções sólidas de Pb(Zr, Ti<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>O<sub>3</sub>) podem ser obtidas para qualquer razão Zr/Ti. Foi desenvolvida e adequada uma infraestrutura que possibilita a preparação do pó e de transdutores piezoeletricos de PZT à partir da mistura dos óxidos (PbO, TiO<sub>2</sub>, e ZrO<sub>2</sub>) em solução sólida. O PZT foi preparado em composições próximas à do contorno de fase morfotrópica tetragonal romboédrica (Zr/Ti = 1). Foram utilizados somente óxidos nacionais e de pureza comercial. As amostras sinterizadas (transdutores) foram polarizadas e suas propriedades piezoeletricas estudadas à partir da medida da curva de transferência em função da frequência (método da ressonância). Resultados preliminares são compatíveis com os dados encontrados na literatura. (FAPESP)

MAT/11.35/4A.F | "ESTUDO DE PROPRIEDADES DIELETRICAS NA SOLUÇÃO SOLIDA SUBSTITUCIONAL (Ba<sub>1-x</sub> Sr<sub>x</sub>(TiO<sub>3</sub>). (\*) Luis Robson Muniz e Walter Maigon Pon tuschka - Instituto de Física da USP.

Efeitos nas propriedades físicas do titanato de bário (BaTiO<sub>3</sub>), em função da presença de titanato de estrôncio (SrTiO<sub>3</sub>), formando uma solução sólida substitucional, foram estudados. Composições com a fórmula genérica (Ba<sub>1-x</sub> Sr<sub>x</sub>)TiO<sub>3</sub>, onde 0 < x < 0,3, foram preparadas e devidamente processadas, obtendo capacitores cerâmicos. Resultados de medidas de constante dielétrica relativa  $\epsilon_r$  (1KHz), fator de perdas tgδ, rigidez dielétrica, resistividade e temperatura de Curie são apresentados e discutidos.

\* Trabalho mantido pela FAPESP.

MAT/11.35/4A.F | TRILHAMENTO ELÉTRICO EM EPDM E SILICONE. Susana Pereira Nunes, Geraldo R. de Almeida (PIRELLI S/A.), Curt E. Henries, Helian Vargas e Fernando Galenbeck (UNICAMP).

Polímeros isolantes, quando submetidos a alta tensão, estão sujeitos à degradação por trilhamento elétrico. Correntes de fuga na superfície do material, cuja intensidade aumenta em presença de contaminantes, e a ocorrência de descargas elétricas localizadas podem expor o polímero a temperaturas que levem à sua decomposição térmica, somada aos efeitos de degradação por bombardeio de elétrons. O perfil de temperaturas a que são submetidos materiais largamente utilizados como isolantes a borracha EPDM e a borracha de silicone - durante o teste de resistência ao trilhamento elétrico (ASTM 2023) foi determinado, filmando-os com equipamento sensível à radiação infravermelha. Observou-se que, durante a degradação, algumas regiões do EPDM atingem 400°C, valor pouco acima de sua temperatura de decomposição, determinada por DSC e TGA. Os produtos de degradação na superfície do polímero estão sendo investigados por espectroscopia fotoacústica na região do infravermelho próximo e, na região fundamental do infravermelho, por espectroscopia convencional de refletância (MIR). Na borracha de silicone degradada, é evidente a diminuição de intensidade das bandas de absorção a 1260 e 800 cm<sup>-1</sup>, características da ligação Si-C-H. Na borracha de EPDM, as bandas a 2900, 2820 e 1455 cm<sup>-1</sup>, correspondentes a ligações C-H, diminuem de intensidade, enquanto as bandas na região de 1000 a 1100 cm<sup>-1</sup> aumentam sensivelmente. Não evidências da presença de aromáticos após a degradação, com aparecimento de bandas a 1600 e 1500 cm<sup>-1</sup>. Tais evidências não reforçadas com o aumento de intensidade das bandas a 1,34, 1,65 e 2,14 μm, detectadas no espectro fotoacústico.

MAT/8:00/5A.F

**PROPRIEDADES MECÂNICAS DE FIBRAS ÓPTICAS.** Ricardo Enrique Madrano UNICAMP (Instituto de Física Gleb Wataghin, Departamento de Física Aplicada)

Uma das características mais importantes das Fibres Ópticas é suas propriedades mecânicas, principalmente sua Resistência Mecânica e a Resistência à Fadiga. A primeira está relacionada com a existência de trincas e a segunda ao crescimento lento destas trincas.

Foram realizados ensaios de tração em fibras com variações da taxa de tensão (e ordem da grandeza). A partir destes resultados foi construída a curva mestre de fadiga, que permite obter com bastante precisão a tensão máxima a ser suportada, para um tempo de vida de 20 anos.

Junto com isto, foi analisada a uniformidade da fibra num comprimento de 3Km e o chamado ensaio de tensão de prova.

MAT/8:2G/5A.F

**ACUMULAÇÃO DE DANOS PRODUZIDOS POR FADIGA COM CARGA VARIÁVEL.** Roberto Facual e Edgardo Manríquez. Instituto Militar de Engenharia.

No presente trabalho tem-se realizado um estudo sistemático das modificações observadas na superfície de corpos de prova de cobre eletrolítico, submetidos a fadiga com diferentes sequências de carregamento e tentou-se fazer uma correlação entre a evolução dos danos observados e os desvios da regra de Miner obtidos experimentalmente.

MAT/8:40/5A.F

**ATRITO INTERNO E MICROSCOPIA ELETRÔNICA DE TRANSMISSÃO EM LIGAS DE Nb-Ti-N e Nb-Ti-N.** - Odila Florêncio - Fundação Universidade Estadual de Maringá; Walter José Botta Filho, José de Anchieta Rodrigues, Tomaz I. Ishikawa, Hiroshi Tejima e José Alberto R. Jordão - Universidade Federal de São Carlos.

Ligas de Nb-Ti (~ 50% p.v. de Ti), com solutos intersticiais, apresentaram picos de relaxação mecânica que estão sendo estudados através de medidas de atrito interno, utilizando pêndulo de torção invertido (tipo Ké).

Amostras contendo diferentes teores de hidrogênio ou de nitrogênio foram observadas por microscopia eletrônica de transmissão. Aquelas com elevados teores intersticiais, apresentaram contrastes de interface que foram associados à presença de precipitados de hidretos ou nitratos, provavelmente ricos em Ti.

Portanto, a combinação dessas duas técnicas é extremamente valiosa no estudo de elementos intersticiais dissolvidos na matriz e/ou precipitação, quando o limite de solubilidade é atingido.

Apoio: FINEP, CNPq, e FII/DNAR.

MAT/9:00/SA.F TENSÃO MECÂNICA E INSTABILIDADES EM FILMES FINOS\* - J. Scarmônio,  
S. Hochlecke, L.P. Cardoso e J.M. Sasaki - UNICAMP - IFGW

Propõe-se estudar a tensão mecânica interna e sua correlação com as instabilidades mecânicas geradas durante e/ou após o crescimento de filmes finos.

Para tanto foram crescidos filmes de Nb sobre Si monocrystalino sob diferentes técnicas e condições de crescimento, gerando diferentes tensões internas. Utilizando difração de raios-X (medimento do ângulo de Bragg com uma câmara de Laue), mediu-se os raios de curvatura dos substratos de Si, à partir das quais são calculadas as tensões internas dos filmes.

Verificou-se também que com a hidrogenação pode-se alterar de forma controlada a tensão interna destes filmes, podendo acima de condições críticas de tensão e adesão, ocorrer instabilidades mecânicas dos tipos flambagens e trincas.

\* Projeto parcialmente financiado pela FAPESP

MAT/9:20/SA.F ESTUDO DO ENVELHECIMENTO DO AÇO 304 POR MEIO DA TÉCNICA DO ATRITO INTERNO.  
L.F.C.P. de Lima (IPEN-CHEM/SP), P.E.V. da Miranda e M.S. Monteiro (COPPE-UFRJ/RJ)

O estudo do envelhecimento de metais da estrutura cubica de corpo centrado, contendo impurezas intersticiais e deformados plasticamente, tem sido realizado utilizando-se, entre outras, a técnica do atrito interno. Esta técnica mostrou-se eficiente pois consegue evidenciar a interação entre esses defeitos e discordâncias, que tem um papel importante nas propriedades mecânicas destes metais.

No presente trabalho o metal estudado é o aço inoxidável austenítico tipo AISI 304. As medidas de atrito interno foram realizadas a baixa freqüência num intervalo de temperatura de 120 a 573K. Os espectros do atrito interno e de freqüência em função da temperatura foram obtidos com amostras submetidas a tratamentos termo-mecânicos específicos. A deformação plástica à temperatura ambiente e a 523K, tanto em tração como em tração, é responsável pelo aparecimento de um pico situado a 260K (18n), cuja magnitude é dependente da quantidade de deformação, e de uma superposição de picos entre 300 e 400K. A obtenção dos espectros após deformação plástica à temperatura de 77K é prejudicada pela existência de um alto amortecimento próximo à temperatura ambiente, provavelmente decorrente de uma transformação de fase.

MAT/9:40/SA.F MOBILIDADE TÉRMICA DE DISCORDÂNCIAS EM SI MONOCRISTALINO  
V.R. Dumke, A.R. Jurelo e F.C. Serbena, Departamento de Física/UFRJ

Serão apresentados e discutidos alguns resultados preliminares de observações feitas em cristais de Si deformados plásticamente e submetidos a tratamento térmico prolongado, ( $900^{\circ}\text{C}$ ),  $t \sim 40\text{h}$ , Argônio). As deformações foram feitas mediante impressão com ponta de diamante em amostras mantidas a  $500^{\circ}\text{C}$ , em presença do ar. Mediante revelação por ataque químico pode-se acompanhar o movimento dos "loops" de discordâncias afastando-se da região deformada e depois coalescendo. A fraca reprodutibilidade que se observa pode ter como causa a difusão de oxigênio junto à superfície durante a impressão.

Apoio CNPq e FINEP.

**MAT/10:15/5A.F** " FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS TIPO 'RIDGE', 'MESA' E 'V' PARA DISPOSITIVOS OPTOELETÔNICOS ". - E.L.Carpi, R.G.Pereira, W.de Carvalho Jr. - CPqD-TELEBRÁS.

Neste trabalho apresentamos um estudo para a obtenção de microestruturas de interesse em optoeletrônica em InP e suas ligas por ataque líquido "wet etching". As estruturas obtidas dependem do plano cristalino. As geometrias de cada estrutura apresentada são bastante diversas. As do tipo "RIDGE" requerem paredes verticais e as do tipo "MESA", curvaturas suaves. Estão sendo estudados diversos parâmetros que afetam as reações, tais como: temperatura, iluminação, stress superficial e diluição.

**MAT/10:35/5A.F**

#### DETERMINAÇÃO DOS EFEITOS INDUZIDOS PELO HIDROGÉNIO EM AÇOS INOXIDÁVEIS.

Alvaro Saavedra e Sergio P. de Oliveira

Seção de Engenharia e Ciência dos Materiais

Instituto Militar de Engenharia - Rio de Janeiro

A microestrutura do aço inoxidável austenítico tem forte influência nos efeitos induzidos pelo hidrogênio. Um acompanhamento desses efeitos por técnicas de difração de raios-x, mostra que apenas os picos de difração da fase martensita alfa não mudam de forma durante a desgaseificação, mostrando que esta fase não sofre distorções causadas pelo hidrogênio nessas condições. Numa análise do perfil da linha de difração pode-se medir a variação do tamanho da partícula e observou-se que o grau de deformação nas amostras que foram previamente laminadas é sempre maior do que nas amostras apenas recocidas e as previamente sensitizadas. A microdeformação da rede das amostras laminadas é também maior, mas recupera-se rapidamente até níveis comparáveis com a recocida e a sensitizada.

**MAT/10:55/5A.F** EFEITO DO HIDROGÊNIO EM PRODUTOS ESMALTADOS, Dilson Silva dos Santos e Paulo Emílio Valadão de Miranda, COPPE-UFRJ

Dos defeitos que ocorrem frequentemente nos produtos esmaltais, a escama de peixe tem sido o mais preocupante para os esmalteiros. Este defeito ocorre através da acumulação do hidrogênio na interface metal-esmalte causando lascas semicirculares por todo produto esmaltado. uma das maneiras que se pode evitar este defeito, nos produtos esmaltais, é produzir uma microestrutura rica em sitios aprisionadores, que venha aprisionar o hidrogênio protônico de uma forma irreversível nas temperaturas de queima do esmalte.

**MAT/11/15/3A.F** RESPOSTA, EM CÉLULA INOX. DO ALCOOL CARBURANTE A DIFERENTES HIDRATAÇÕES, SOB ESTÍMULO DE CORRENTE ALTERNADA FRACA, NA GAMA DE FREQUÊNCIAS 5 Hz a 550 Hz - O.N. de Souza, A.L. de Oliveira, G. de O. Damasceno e J. de Oliveira

O aparelho de medidas utilizado foi um impedâncímetro vetorial HP-4800A. Utilizamos, como célula de medidas, um capacitor inox de geometria cilíndrica e com as seguintes dimensões:  $h = \text{altura} = (11,12 \pm 0,01) \text{ cm}$ ;  $a = \text{raio da parede externa do cilindro interno} = (2,28 \pm 0,01) \text{ cm}$ ;  $b = \text{raio da parede interna do cilindro externo} = (2,40 \pm 0,01) \text{ cm}$ .

Fizemos sucessivamente medidas com as seguintes amostras: AEHC 1(0,8075), 2(0,8194), 3(0,8450), 4(0,8692), 5(0,8927), 6(0,9155), 7(0,9368), 8(0,9555), 9(0,9704), 10(0,9836), H<sub>2</sub>O(0,9950). AEHC significa álcool etílico hidratado combustível (amostras 1 a 10). A amostra 1 é de álcool combustível como se compra de um fornecedor. A ela adjuntaram-se quantidades crescentes de água batedeira (amostras 2 a 10). A última medida foi feita com água bidestilada pura.

Os diagramas de Cole-Cole obtidos permitem evidenciar fenômenos interfaciais e volumétricas. Um aprofundamento no estudo do caráter corrosivo das soluções só será possível utilizando-se equipamentos que nos permitam trabalhar a frequências bem mais baixas que as utilizadas. Foram determinadas frequências características de relaxação e constantes dielétricas do AEHC em função da hidratação.

**MAT/11/35/5A.F**

#### FILMES FINOS DE POLÍMERO COM INCORPORAÇÃO DE SILÍCIO

A. Vilche, R. P. Mota, R. Parissari e M.A. Bica de Moraes

IFGW - UNICAMP Campinas - C.P. 6165 Campinas S.P.

Filmes finos de polímero com incorporação de silício foram feitos usando a técnica combinada de "descarga luminescente" (para a formação do polímero a partir do acetileno) e sublimação do silício (usando um filamento de N). Os resultados das medições da condutividade elétrica em função da temperatura são mostrados, assim como a microestrutura destes filmes através da Microscopia Eletrônica.

**MAT/11/55/5A.F**

#### EFEITOS DA IMPLANTAÇÃO DO BI EM FOTORESISTES, Renato Guimarães, Lívio Amaral, Moni Behar, Joel P. de Souza e Fernando C. Zavialak (Instituto de Física da Universidade Federal do RS).

Um ion pode ser implantado em polímeros fotoresistores dê origem a quebras de ligações químicas. Os átomos, livres, se recombina, formando moléculas gasosas que são liberadas através da superfície.<sup>1</sup>

A partir da superfície até a região de máximo alcance do íon incidente, é formada uma camada, rica em carbono, com propriedades físicas e químicas, diferentes das propriedades características do polímero original.<sup>2</sup>

A implantação do Bi no fotoresistente AZIII, nos mostra que, em comparação ao polímero original, esta camada rica em carbono é mais resistente à temperatura, e tem menor difusibilidade para o Bi que o polímero AZIII.

<sup>1</sup>Venkatesan T. - Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B7/8 (1985) 461.

<sup>2</sup>Owek, E.J. and Huffman, C. - Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B7/8 (1985) 501.

**MAT/8:00/6A.F** MEDIDA FOTOACÚSTICA DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE MATERIAIS TRANSPARENTESES: POLÍMEROS. H.P.Leite (PEG/UNESP), N.Cella, H.Vargas (I.Física-UNICAMP), L.C.M.Miranda (INPE/MCT).

Neste trabalho será mostrado que o método da diferença de fase entre a iluminação traseira e dianteira para a medida da difusividade térmica de polímeros com espessuras da ordem de 200 $\mu$ m é aplicado somente um intervalo limitado de frequência abaixo de 12Hz. Para estas amostras o mecanismo dominante para frequências no intervalo de 10 a 100Hz é proveniente de processos termoelásticos. Neste caso a difusividade térmica pode ser então obtida a partir da dependência com a frequência da fase dianteira do sinal fotoacústico.

Este método foi aplicado com êxito em polietileno de baixa densidade e teflon, estamos estendendo-o a outros materiais.

**MAT/8:20/6A.F** AVALIAÇÃO DA ESPESSURA DE FILMES FINOS SEMICONDUTORES DE Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> E Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> POR CAPACITÂNCIA DIFERENCIAL - J.F.JULIÃO (Dept. de Física, UFC), U.U.GO-MES (DFTE, UFRN) e G.G.PINATTI (Instituto de Física da UNICAMP e F.T.I.).

Medidas de capacidade diferencial pela técnica de C-V Eletroquímico foram efetuadas em filmes de pentóxido de Nióbio, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> e pentóxido de tântalo, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, crescidos por anodização numa solução eletrolítica de H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, à num temperatura de 80°C. As medidas foram feitas nas mesmas condições de formação dos filmes. Os resultados mostram que a espessura de cada filme, avaliada pela quantidade de carga que passa no circuito externo durante o processo de anodização coincide com o valor da largura padrão de Debye da camada espacial de cargas do filme semicondutor, avaliada a partir de gráficos Mott-Schottky. (FIPPEC/CNPq).

**MAT/8:40/6A.F** ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA COM RAIOS X: DETEÇÃO COM CÉLULA ABERTA. Manoel Marcos Freire d'Aguilar Neto. (Instituto de Física da UFSCa.), H.Vargas (Instituto de Física da Unicamp) e L.C.M.Miranda (Instituto de Pesquisas Espaciais).

O efeito fotoacústico (fototérmico) pode ser aplicado em qualquer região do espectro eletromagnético e os raios X foram usados como radiação. Numa célula aberta os raios X foram absorvidos por uma amostra de chumbo com espessura de 50 $\mu$ m que era a própria janela da célula. Com o gerador operando a 45EV com uma corrente de 80mA foi analisada a variação do sinal fotoacústico com a frequência de modulação da radiação. Para estudar a resposta da célula com a intensidade da feixe, a corrente foi variada a uma dada frequência de modulação. Pretendemos verificar a possibilidade de utilização do método no estudo das transições estruturais de fase.

MAT/8:40/6A.F

## MEDIDA DE RUGOSIDADE POR CORRELAÇÃO FOTOGRAFICA SIMULTÂNEA

J. J. Lunezzi, M.S. Stahl - Unicamp, N.G. Gaggioli, E.M. Hugert - Instituto Nacional de Tecnologia Industrial - INTI - Argentina

A técnica de correlação fotográfica simultânea (superposição da feixe luminoso com o seu negativo fotográfico, coletando-se a luz no detetor) foi aplicada pela primeira vez ao caso da medição da rugosidade de superfícies. Trata-se de superfícies despolidas aleatoriamente onde a correlação é medida conforme vai sendo mudado o ângulo de incidência. Obtiveram-se destas maneira resultados que permitem obter a dispersão standard do valor da rugosidade (R.M.S.) no campo de valores de 1-30µm. O sistema resulta mais simples, compacto e confiável que os precedentes, sendo também muito mais barato e fácil de reproduzir que os que operam por sensoramento mecânico, permitindo inclusive sua aplicação ao caso de materiais brandos. Os resultados obtidos encorajam-nos para tentar novas soluções técnicas que aumentem a performance do instrumento.

MAT/9:00/6A.F

## CARACTERIZAÇÃO DE CÉLULAS FOTOVOLTAICAS USANDO ESPECTROSCOPIA DE DEFLEXÃO FOTOTÉRMICA (EFEITO MIRONE) : H.L.Rietta (IEAv-CTA - S.J.dos Campos), L.C.M. Miranda (L.A.S.N./INPE - CP. 515 - S.J.dos Campos), H.Vargas (IPGW-UNICAMP).

Será apresentado o uso de espectroscópios fototérmicos de deflexão para a caracterização de células fotovoltaicas em contato. Esta técnica é capaz de fornecer a resistência de carga ideal e a eficiência quântica bem como o valor da resistência interna em série da célula. Uma comparação com outras técnicas fototérmicas também será discutida.

MAT/9:20/6A.F

## CARACTERIZAÇÃO ULTRASSÔNICA DO QUARTZO E MATERIAIS CRIPTOCRISTALÍNOS Armando Hideki Shinohara, Daisan Irikai e Carlos K. Suzuki (Instituto de Física - UNICAMP)

No presente estudo, através da técnica ultrassônica utilizando a método pulso-sco à temperatura ambiente, fator de atenuação foi medido com a frequência na faixa de 10 a 80MHz em laços de quartzo graduadas de 1° e 4° por inspeção visual e nos quartzos sintéticos selecionados. Nos materiais criptocrystalinos classificados em fibrosos (ágata, ônix, serdo, etc) e granulares/flexíveis, jaspes, etc) foram medidas as velocidades de propagação de ondas elásticas de modos longitudinal e transversal com a frequência de 10MHz. Nas laços de quartzo provenientes de duas jazidas o fator de atenuação foi medido na direção próxima a Z do eixo cristalino com a frequência de 10MHz. Observou-se uma correlação entre a graduação e o respectivo fator de atenuação. Nos quartzos sintéticos o estudo do efeito da semente e das inclusões no fator de atenuação foi realizado na direção Z do eixo cristalino com a frequência na faixa de 10 a 80MHz para o modo longitudinal e com a frequência de 10MHz para o modo transversal. Os dados obtidos verificou-se que o fator de atenuação para ondas elásticas transversal é influenciado pela semente entretanto este efeito não ocorre para as inclusões.

No estudo de materiais criptocrystalinos utilizando as amostras de ágata os/flex as constantes elásticas fundamentais C11, C12 e C44 foram calculadas utilizando as velocidades de propagação e a densidade do material. Os módulos de Bulk e de Cisalhamento obtidos experimentalmente foram correlacionados com os valores teóricos e os valores experimentais mostraram-se próximos aos valores teóricos. Os valores do fator de anisotropia medidas mostraram-se maiores que 1.1 . (JICA, ABC-Xtal, FAPESP)

**METAIS E LIGAS**

**Coord.: - José D'Albuquerque e Castro (UFF)**

MET/8:00/4A.F

FUNÇÕES DE GREEN PARA REDES DE VALÊNCIA INTERMEDIÁRIA.

Gerardo Martinez e Mário E. Foglio, Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, C.P. 6165, Campinas, SP, CEP 13081.

Um método para tratar com os operadores de Hubbard que aparecem em valência intermediária já tem sido discutido pelos autores num Encontro anterior (1). Nós temos extendido agora essa técnica ao cálculo das funções de Green no espaço de momontum e freqüências imaginárias (Matsubara). O tratamento inclue as interações entre sítios da rede e permite tratar ions com degenerescência orbital, aplicável portanto a compostos de terras raras. Como exemplo apresentamos o cálculo destas funções de Green para o modelo de Anderson periódico com U infinito. Neste caso, temos somado infinitos diagramas do tipo mais simples possível, e achado efeitos de muitos corpos nas energias de quasi-partículas. Os nossos resultados coincidem com os que Hewson (2) tem publicado, embora, sem demonstração. Uma discussão da extensão destes resultados para sistemas com uma degenerescência maior que a de Anderson, assim como também a inclusão de diagramas mais complexos na teoria, será apresentada neste Encontro.

(1) G. Martinez e M. E. Foglio, IX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Poços de Caldas, MG, Abril 1986 (Comunicação MET-05).

(2) A. C. Hewson, J. Phys. C 10 4173 (1977).

MET/8:20/4A.F

ESTUDO DE UMA TÉCNICA PERTURBATIVA COM UM MODELO EXATAMENTE SOLÚVEL. Ana Maria Rodrigues e Mário E. Foglio, Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, S.P.

Os diagramas de Goldstone tem sido usados por vários autores (1) para calcular a função de partição de sistemas com forte correlação local. Pelas suas características este método é denominado "do tipo de Wigner-Brillouin" (W.B.).

Quando aplicado ao modelo de Anderson, a baixas temperaturas, esta técnica apresenta dificuldades no regime Kondo. Para analisar o problema consideramos um modelo de banda infinitamente estreita que é exatamente solúvel (2), e compararmos a solução exata com o resultado da técnica de W.B. na aproximação mais simples. Mostramos que o método de W.B. não descreve corretamente o estado fundamental no regime Kondo. Compararmos as energias obtidas pelo método aproximado das "quasi-partículas reais" (3), com as obtidas pelo método de W.G., que utiliza as "quasi-partículas estatísticas". Calcularmos as probabilidades pelo método W.B. e as compararmos com os resultados exatos.

(1) H. Keiter e J.C. Kimball, Int. J. Magnetism 1, 233 (1971).

(2) H. Keiter, Z. Phys. 230, 167 (1978).

(3) H. Keiter e G. Morandi, Phys. Reports 103, 227 (1984).

MET/8:40/4A.F

ESTADO FUNDAMENTAL DE UMA IMPUREZA DE URANIO EM METAIS: INCLUSÃO DE EXCITAÇÕES ELECTRÓN-BURACO DO MAR DE FERMI. MARIA CRISTINA F. L. LARA E ANTONIO CLEVES NUNES - UnB - DEPARTAMENTO DE FÍSICA, 70010 BRASÍLIA-DF.

O estado fundamental e uns poucos estados excitados de uma impureza de Urânio de Anderson flutuando entre duas configurações magnéticas num mar de elétrons livres é re-examinado incluindo-se excitações elétron-buraco do Mar de Fermi nas funções variaacionais. Verifica-se que a simples presença de um par elétron-buraco aumenta a energia de separação entre o singuleto e o estado magnético por um fator variando de 1.8 a - 3, dependendo da razão entre as larguras das bandas de condução e nível f respectivamente.

MET/9:00/8A.F

FOTOEMISSÃO NO MODELO DE ANDERSON - FALICOV  
Hidembergue O. Prota - Universidade do Amazonas

Em trabalho recente <sup>(1)</sup> estudamos a fotoemissão no modelo de Anderson de uma impureza, com a utilização da técnica de Grupo de Renormalização desenvolvida por Wilson <sup>(2)</sup>. No presente trabalho estamos generalizando o cálculo anterior, levando em consideração o efeito da interação coulombiana entre os elétrons do orbital da impureza e os elétrons de condução, o que equivale a acrescentar o termo

$$H' = C_{fu}^+ C_{fu} \sum_k C_{ku}^+ C_{ku}$$

ao hamiltoniano de Anderson, onde  $C_{fu}$  destrói um elétron de spin u no orbital da impureza e  $C_{ku}$  destrói um elétron de spin u' na banda de condução.

- 1) Hidembergue O. Prota and Luiz N. Oliveira, Phys. Rev. B 33, 7871 (1986)
- 2) H.R.Krishna-murthy, J.W.Wilkins, and K.G.Wilson, Phys. Rev. B 21, 1003 (1980); 21, 1044 (1980)

MET/9:20/8A.F

FOTOEMISSÃO DE UM NÍVEL PROFUNDO EM  
COMPOSTOS DE VALÊNCIA FLUTUANTE  
Makoto Yoshida e Hidembergue O. Prota - U. do Amazonas

Dando continuidade aos estudos realizados no modelo de Anderson de uma impureza, com aplicações a compostos de valência flutuante <sup>(1)</sup>, discutimos a fotoemissão de um nível profundo para quaisquer parâmetros do modelo, dado a importância dessa - espectroscopia para a determinação do número de ocupação do orbital 4f dos elementos de terras-raras naqueles compostos.

- 1) Hidembergue O. Prota e Luis N. Oliveira, Phys. Rev. B., 33, 7871 (1986)

MET/9:40/8A.F

RESSÔNÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE SISTENAS ABSORVIDOS EM METAIS -  
Marisa A. Whitaker e Luis Nunes de Oliveira, DFCM/IFQSC/USP

Estudamos teoricamente a relaxação nuclear de moléculas adsorvidas em substratos metálicos, tomando como base medidas de NMR do <sup>13</sup>C do CO adsorvido quimicamente em platina, feitas por Rudas et al. <sup>(1)</sup>. Calculamos tempos de relaxação spin rede nuclear de uma molécula adsorvida em uma superfície metálica usando o modelo de Anderson de uma impureza. A diagonalização do Hamiltoniano de Anderson se baseia em técnicas de grupo de renormalização e a taxa de relaxação é calculada na aproximação da regra de Ouro de Fermi. Serão apresentadas e discutidas curvas de dependência com a temperatura da taxa de relaxação spin rede.

- (1) S. Rudas et.al., Phys. Rev. Lett. 54, 71 (1985).

**MET/10:15/4A.F** ESPECTRO DE EPR DE IONS COM ESTADOS FUNDAMENTAIS NÃO S EM COMPOSTOS DE VALENÇIA INTERMEDIÁRIA (VI). Pablo A. Venegas U. e Gaston E. Barberis- Instituto de Física, UNICAMP- 13081 Campinas (S.P.)

Nestes últimos anos tem-se publicado resultados experimentais de ions de terras raras com estado fundamental não S em  $\text{CePd}_3$ , que é um composto que apresenta efeito de VI, e  $\text{YD}_3$  como prova. Visando interpretar esses espectros experimentais foi feita uma simulação dos espectros de  $\text{CePd}_3\text{:Dy}$  e  $\text{YD}_3\text{:Er}$  (P. A. Venegas U. and G. E. Barberis, Proc. of the V International Conf. on Valence Fluctuations, Plenum ) obtendo-se alguns parâmetros importantes como o de campo cristalino cúbico, no segundo caso com bastante precisão quando comparado com resultados experimentais de espalhamento inelástico de neutrons. Porém, estes espectros apresentam um comportamento das intensidades das linhas de ressonância que dependem do campo magnético aplicado. Neste trabalho introduzimos através de um modelo estocástico o efeito de VI para descrever este tipo de comportamento.

**MET/10:35/4A.F** ESTUDO DE EPE E CAMPO CRISTALINO EM  $\text{UPd}_3$ : - Maria José Pontes e Flávio G. Gandra - UNICAMP - IFGW - Campinas, SP.

O composto  $\text{UPd}_3$  é estudado como referência para o composto ferromagnético  $\text{UPt}_3$  por apresentar a mesma estrutura hexagonal e possuir densidade de estados no nível de Fermi comparável a um metal normal.

Os espectros de EPE obtidos para  $\text{UPd}_3$  apresentam 2 sítios distintos: um cúbico e um hexagonal que são analisados separadamente. A partir da hamiltoniana para o campo de simetria hexagonal construímos o esquema de níveis para os Ions  $\text{Er}^{3+}$  e  $\text{Dy}^{3+}$  para o sítio hexagonal. Foram calculados os valores de  $\delta_{\text{perp}}$  e  $g//$  em função do parâmetro de campo cristalino  $x$  para o sítio hexagonal ocupado pelo Er como impureza magnética em  $\text{UPd}_3$ . A partir do espectro experimental do pó determinamos  $\delta_{\text{perp}} = 9.22$  para o Er que corresponde a  $x=0.5$ . Utilizando esta valor de  $x$  para o sítio cúbico, é previsto um estado fundamental  $\Gamma_6$  e um estado excitado  $\Gamma_7$ , muito próximo enquanto que para o Dy,  $x=0.5$  é previsto um  $\Gamma_7$  fundamental. Os espectros experimentais confirmam estas previsões com  $g(\Gamma_6) = 6.59$  e  $g(\Gamma_7) = 7.06$  para o Er e  $g(\Gamma_7) = 8.16$  para o Dy. Os valores de  $g$  são maiores que em isolantes devido à alta suscetibilidade da matriz. Este trabalho foi parcialmente financiado pelo CNPq e FAPESP.

**MET/10:55/4A.F** EPR DE IONS TERRAS RARAS EM COMPOSTOS INTERMETÁLICOS DO TIPO  $\text{Cu}_x\text{Au}$ . J. P. Susassuna e F.C.G. Gandra.

Neste trabalho, resultados experimentais de Ressonância Paramagnética Eletrônica de Ions de terras raras  $\text{Gd}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Er}^{3+}$  e  $\text{Tb}^{3+}$  em compostos intermetálicos do tipo  $\text{Cu}_x\text{Au}$  são apresentados e analisados. Estão sendo investigadas as séries  $\text{AB}_3$ : TR (A = La, Ce, Y e Sc; TR = Gd, Nd e Tb) e  $\text{APt}_3$ : TR (A = La, Y e Sc; TR = Gd, Er e Tb) além do composto  $\text{ScPd}_3\text{:TR}$  (TR = Gd, Er e Tb). A exemplo do que já foi observado nas séries tipo AB e  $\text{AB}_2$ , verifica-se nestas séries  $\text{AB}_3$  que os deslocamentos do fator g das linhas de EPR dependem de modo sistemático da posição do elemento B na tabela periódica. Além disso, o valor e o sinal do parâmetro de acoplamento de troca,  $J_{\text{ex}}$ , foram encontrados dependentes tanto da posição do elemento B como do íon de terra rara TR, diluído na matriz. Estes resultados, juntamente com aqueles obtidos na série  $\text{APd}_3$ , já existentes na literatura<sup>1</sup>, são discutidos levando-as em conta o caráter  $s$  ou  $d$  dos elétrons de banda bem como o raio iônico das impurezas localizadas de terras raras.

Trabalho subvencionado pelo CNPq e FAPESP.

1 - S.E. Barnes, ADVANCES IN PHYSICS, 30, 6, 801 (1981)

MET/11:15/AA.F EPR NOS COMPOSTOS  $\text{LaNi}_{5-x}M_x$  ( $M = \text{Al, Pd, Cr, Mn e Pt}$ ) E NOS SEUS

HIDRETOS METÁLICOS. L.S. Duarte e J.F. Suassuna.

Estamos investigando os compostos metálicos da família do  $\text{LaNi}_5$ , onde átomos de Ni são substituídos por Al, Pd, Cr, Mn e Pt, usando a técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica e o  $\text{Cd}^{3+}$  como fôton de prova. Como é bem sabido, o  $\text{LaNi}_5$  é um composto de alta importância tecnológica devido sua capacidade de absorver grandes quantidades de hidrogênio em condições normais de temperatura e pressão. A substituição do Ni pelos elementos M visa correlacionar fatores eletrônicos e estruturais nessa série com a estabilidade dos hidretos correspondentes, via parâmetros de EPR. Verificamos que, para  $M = \text{Al e Pd}$ , o g-shift da linha de EPR do  $\text{Cd}^{3+}$  varia drasticamente de negativo ( $g_g = -0,12$ ) no  $\text{LaNi}_5$  para positivo ( $g_g = +0,05$ ) no  $\text{LaNi}_{5-x}\text{Al}_x$  ( $0 < x \leq 1$ ) e  $\text{LaNi}_{5-x}\text{Pd}_x$  ( $0 < x \leq 5$ ). As investigações para  $M = \text{Cr, Mn e Pt}$  estão em andamento. Quando os compostos são hidrogenados, o valor de g se desloca (sempre para o lado positivo) evidenciando efeitos de estrutura eletrônica causados pela absorção de átomos de hidrogênio. Uma discussão dos resultados de EPR em termos da estabilidade dos hidretos  $\text{LaNi}_{5-x}M_xH$  será apresentada.

Este trabalho está sendo subvenzionado pelo CNPq, FAPESP e CAPES.

MET/11:35/AA.F VARIACAO DA ANISOTROPIA COM A TEMPERATURA EM COMPOSTOS C15: MEDIDAS DE CORRELACAO ANGULAR DIFERENCIAL (CAD). Paulo R.J.Silva e Henrique Saitovitch (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CNPq, Rio de Janeiro)

O composto binário do tipo C15, HfV2, apresenta temperatura de transição supercondutora  $T_c$ -9K. Ainda apresenta uma transição estrutural cúbica-ortorrômbica em  $T_l$ -110K. Medidas de correlação angular integral, no intervalo de temperaturas 83K-300K, realizadas no HfV2 por Jain et al.(\*) evidenciam uma variação de 0,25 a 0,12 nos valores da anisotropia quando a temperatura variava de 300K a 83K. Tal variação foi associada a recuo do isótopo-sonda quando da emissão de radiação gamma e a ocorrência de flutuação em microdomínios eventualmente existentes na fase cúbica do composto, acima de 110K.

Através de medidas de (CAD) no HfV2 determinamos os valores das interações quadripolares, assim como os valores das anisotropias, no intervalo de temperaturas 4,2K-800K. Para tanto utilizamos um sistema de medidas com quatro detectores e endereçamento simultâneo de coincidências; o isótopo-sonda foi o  $\text{Ta}^{181}$  e o HfV2 foi fabricado em forno de arco, em atmosfera de argônio. As medidas de (CAD) mostraram:

- a transição estrutural ocorre em intervalo de temperatura de dez graus, convivendo nesse intervalo as fases cúbica e ortorrômbica;
- b) tratamento térmico a 1000C, durante 15 dias, não parece alterar as propriedades do HfV2;
- c) os valores de interação quadripolar sofrem grande variação ao passar o composto da fase cúbica para ortorrômbica;
- d) os valores da anisotropia no instante  $t=0$ , naquele intervalo de temperatura em que ocorreram as medidas, não apresentam variações marcantes.

(\*)"Lat. Inst. Eff. in HfV2 Lat"-H.C.Jain et al.: Physics Letters 95A(1983) 419.

MET/11:55/AA.F OXIDAÇÃO INTERNA EM LIGAS DILUIIDAS DE FeV. Maria Teresinha Xavier Silva, J. Schaf, P.J. Viccaro e A. Vasques (IP-URGS), T.A. Campbell, K. Le Dang e P. Veillet (Université Paris-Sud, Orsay França)-

Ligas de FeV 0,5 at % em pó foram caracterizadas através das técnicas de ESR de Spin e Espectroscopia Mossbauer. Observou-se, por ambas as técnicas, que um tratamento térmico a 1000 K por 10 minutos (em vácuo) leva à precipitação dos átomos de vanádio para fora da rede do ferro. Este fato foi interpretado como um efeito de oxidação interna do vanádio devido à presença de oxigênio adsorvido na superfície dos grãos das amostras. A ocorrência deste efeito está sendo agora verificada em lâminas e para tratamentos térmicos a temperaturas menores que 1000 K, utilizando-se a Espectroscopia Mossbauer.

**NET/8:00/5A.F** APROXIMAÇÕES ANALÍTICAS PARA A DENSIDADE DE ESTADOS EM SISTEMAS DESORDENADOS. Luis Carlos S. do Nascimento (Universidade Federal Fluminense - Instituto de Física).

Considera-se uma liga binária do tipo  $A_xB_{1-x}$ , descrita por uma Hamiltoniana de ligações fortes, com interações entre primeiros vizinhos, um orbital por site, e desordem diagonal.

Utilizando-se a teoria de frações contínuas, obtém-se aproximações analíticas para a densidade de estados eletrônicos de uma cadeia unidimensional desse tipo. O método pode ser facilmente estendido para uma rede de Bethe.

Compara-se os resultados com as aproximações analíticas usuais tipo VCA, ATA e CPA.

**NET/8:20/5A.F** "ORBITAIS MOLECULARES" DE METAIS E LIGAS . Diana Guenzburger, e D.E. Ellis(Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas e Northwestern University.).

Propriedades magnéticas,elétrônicas e hiperfinas de metais e ligas são estudadas calculando-se a estrutura eletrônica de aglomerados finitos de átomos pelo método Variacional Discreto (D.E.Ellis, Int. J. Quant. Chem. 2 , 35(1968)) na aproximação de densidade local para a interação de troca, com polarização de spin. Alguns sistemas estudados são as ligas de Fe e Ti, as ligas de Fe e Ni ordenadas e desordenadas, e as ligas de Fe e Al. São obtidas densidades de estado, deslocamentos isotânicos Mössbauer , momentos magnéticos e gradientes de campo elétrico. (D. Guenzburger e D.E.Ellis, Phys. Rev. B 31, 93 (1985); J. Mag. Mag. Mat. 59, 139 (1986); D. Guenzburger e D.E.Ellis, a ser publicado).

**NET/8:40/5A.F**

Determinação da Resistividade Elétrica e Comportamento Crítico em Ferromagnets'

Francisco A. O. Cabral, Sergio Gama e Renato F. Jardim - DFESCM - UNICAMP

Através de uma simples montagem experimental nós estudamos o comportamento crítico da resistividade elétrica em sistemas ferromagnéticos nas vizinhanças da temperatura de Curie ( $T_c$ ).

O mesmo aparelho é utilizado na determinação de  $T_c$  em sistemas (Nd-Fe) com apropriáveis concentrações de Fe.

(\*) Parcialmente financiado pela FAPESP

NET/9:00/5A,F

## MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA SEM CONTATOS EM METAIS\*

Ronato de F. Jardim, Bernardo Laka e Cláudio Santos - DIFESCM - IPGM - UNICAMP

O método da contra corrente (Eddy Current Decay Method) e o método A.C. (Steady-State), para medidas de resistividade elétrica em metais sem contatos, são comparados em termos da teoria de sistemas lineares. Teoricamente ambos os métodos são equivalentes, mas dentro das considerações experimentais o método A.C. é preferível para uma larga faixa de valores de resistividades.

Uma versão simplificada do método A.C., baseada na medida do ângulo de fase é descrita, onde uma simples medida deste é suficiente para a determinação do valor absoluto da resistividade.

O tratamento exato para a geometria cilíndrica macia e para amostras com geometria tipo cilindro circular oco são originais e apresentam resultados interessantes.

\* Financiado parcialmente pela FAPESP.

NET/9:20/5A,F

## DETERMINAÇÃO DE ESPESSURA E CONDUTIVIDADE DE CAMADAS METÁLICAS CILÍNDRICAS SEM CONTATOS

Ronato de F. Jardim, Bernardo Laka e Cláudio Santos - DIFESCM - IPGM - UNICAMP

O método A.C. (Steady-State) para a determinação de condutividade elétrica em camadas metálicas é discutido. São apresentados dois casos distintos:

- a) Camada de condutividade  $\sigma_1$ , e espessura D cobrindo um cilindro isolante ( $\sigma_2 = 0$ ) e raio a.
- b) Camada de condutividade  $\sigma_1$ , e espessura D cobrindo um cilindro de condutividade  $\sigma_2$  ( $\sigma_2 \neq 0$ ) e raio a.

São apresentadas comparações com camadas metálicas (filmes) com geometria retangular.

\* Financiado parcialmente pela FAPESP.

NET/9:40/5A,F

## SISTEMA PARA MEDIDA DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA PELO MÉTODO DA CONTRA-CORRENTE. Fernando M. Araújo Moreira e José Antônio Kiras (Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos - São Carlos-SP).

O método da contra-corrente (eddy-current method) é particularmente adequado para medir a resistividade elétrica de amostras metálicas com baixa resistividade e à baixas temperaturas, quando o método dos quatro terminais torna-se impreciso. A técnica da contra-corrente consiste fundamentalmente em reduzir bruscamente à zero o campo magnético constante aplicado à amostra, que se encontra no centro de um sistema de bobinas concêntricas (primário e secundário). A variação brusca do campo magnético induz na amostra correntes de Foucault, cujo decaimento exponencial com o tempo é detectado pela bobina secundária. Pode-se mostrar que a constante de tempo desse decaimento exponencial é inversamente proporcional à resistividade elétrica  $\rho$  do material ( $t = p-1$ ). Está sendo montado um sistema que permite identificar a região na qual o sinal detectado pelo secundário é uma exponencial pura. Mantendo o sistema de bobinas a 77K pretende-se adequar o sistema para medir resistividades absolutas entre 77K e 350K.

**MET/10:15/5A.F** ESTADOS ELETRÔNICOS EM INTERFACES METÁLICAS - Gilmar E. Marques, José P. Rino e Nelson Studart : Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Estados eletrônicos próximos de uma interface metal-vacuo são formados pela interação atrativa dos elétrons com as densidades de carga de polarização induzidas nos metais. O potencial é comumente denominado potencial imagem e os estados localizados são conhecidos como estados interfaciais.

Superfícies metálicas apresentam uma grande variedade de estados superficiais dependendo do material e da orientação cristalográfica do plano da superfície do metal.

Até o presente, os cálculos destes estados eletrônicos usam um modelo muito simplificado de potencial para se determinar o espectro de absorção ou de emissão destes estados quânticos.

Resultados experimentais de foto-emissão ou foto-absorção inversa demonstram a necessidade de melhores modelos teóricos, uma vez que as séries de níveis eletrônicos resultantes do modelo de potencial imagem clássico permitem apenas uma descrição qualitativa destas interfaces.

Neste trabalho estamos propondo calcular a estrutura eletrônica de estados eletrônicos em interfaces metálicas onde o potencial confinador é determinado pela solução da numérica da equação de Poisson para um sistema onde a constante dielétrica varia suavemente desde seu valor no metal (bulk) até o valor 1 no vacuo, e fazendo o "matching" deste potencial periódico do metal em um certo plano conveniente. Com este modelo esperamos poder descrever estes estados interfaciais de maneira mais realista e com melhor precisão que os resultados obtidos com o potencial imagem clássico com um corte .

**MET/10:35/5A.F** PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SISTEMA INTERMETÁLICO  $Hf(Fe_{1-x}Al_x)_2$

C. M. da Silva\*, F. P. Livi\*, E. Panaretto\*\*, S. F. da Cunha\*\* e A. A. Gomes\*\*

(Universidade Federal do Rio Grande do Sul) e (\*\*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas).

O sistema intermetálico, pseudo-binário,  $Hf(Fe_{1-x}Al_x)_2$  foi obtido para concentrações entre  $x=0,02$  e  $x=0,60$ . É sabido que o extremo  $HfFe_2$  apresenta uma mistura de fase estrutural C14 e C15. Esta mistura de fase permanece até que para  $0,15 \leq x \leq 0,60$  difratogramas de raio-x mostram uma fase C14 hexagonal pura. Nesta faixa de concentração foram feitas algumas medidas de magnetização em função da temperatura e do campo aplicado. Para  $x=0,30$  e  $x=0,35$  ocorrem efeitos diferentes a baixas temperaturas, quando as amostras são resfriadas com e sem campo magnético aplicado. A temperatura de Curie decrece com o aumento da concentração de Al como previsto. São feitas também algumas considerações sobre a estabilidade estrutural, assim como uma proposta para a descrição da estrutura eletrônica em presença de desordem induzida pelo Al.

**MET/10:55/5A.F** ESTRUTURA ELETRÔNICA DO HIDRETO DE  $Pd_3Fe$ . Edison Z. de Silva e C.A. Kuhnen, Instituto de Física - UNICAMP - Campinas.

Usamos o formalismo LMTO (Linear Muffin-Tin Orbital Method) para estudar a estrutura eletrônica do  $Pd_3FeH$  na fase ferromagnética. A análise das bandas de energia e densidade de estados fornece um bom entendimento da influência do hidrogênio no composto intermetálico  $Pd_3Fe$ . Verificamos uma redução drástica dos momentos magnéticos nos vários sítios no caso do composto hidrogenado. Verificamos também que a hidrogenação acarreta em um aumento considerável no coeficiente linear do calor específico eletrônico, o que evidencia as alterações marcantes nas propriedades físicas do  $Pd_3Fe$  após a hidrogenação.

MET/11:15/5A.F DETERMINAÇÃO "AB INITIO" DA CONSTANTE DE RIGIDEZ DE MAGNONS NO FERRO E NO NIQUEL. R. Bechara Muniz, J. d'Albuquerque e Castro (Instituto da UFF Niterói - RJ - 24.210) e E. Z. da Silva (Instituto de Física da Unicamp - Campinas S.Paulo).

A constante de rigidez de magnons é calculada para o Ferro e para o Níquel utilizando a aproximação local para a interação de correlação e troca e o método LMTO (linearized muffin-tin orbitals) na aproximação ASA (average sphere approximation).

Os resultados obtidos estão em excelente acordo com os valores experimentais; o que é particularmente significativo no caso do ferro, para o qual cálculos anteriores apresentam considerável discrepância com a experiência.

MET/11:35/5A.F BANDAS COM POLARIZAÇÃO DE SPIN VIA MÉTODO DE RECORRÊNCIA. Sonia Frota-Pessôa (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Apresentamos um esquema simples baseado no método de recorrência, numa Hamiltoniana "tight-binding" parametrizada usando o LMTO e numa versão autoconsistente do critério de Stoner, que nos permite avaliar momentos magnéticos em ligas de metal de transição. O esquema não envolve nenhum parâmetro ajustável e pode ser aplicado para calcular a distribuição de momentos locais em materiais amorfos.

Para ilustrar o procedimento calculamos os momentos magnéticos de Fe e Ni no  $\text{FeNi}_3$ , sistema cristalino densamente empacotado. Nossos resultados concordam bem com os resultados de Jepsen e Herman, obtidos usando o método LMTO, auto-consistente e spin polarizado para o mesmo material.

MET/11:55/5A.F BLINDAGEM ELETRÔNICA NAS PROXIMIDADES DA TRANSIÇÃO HIDROGÊNIO-MOLECULAR-HIDROGÊNIO METÁLICO. F. A. OLIVEIRA e A. FERRAZ, Departamento de Física - UnB - 70910 - Brasília-DF

Usando uma constante dieletétrica estática que incorpora efeitos de estados de baixa excitação nós calculamos a massa efetiva reduzida e a energia do exciton de Wannier em função do gap de energia, para valores de  $r_s$  próximos à transição Isolante-Metal. Nossos resultados sugerem um crescimento da massa efetiva antes da transição discontinua para a fase metálica.

MET/8:00/6A.F MÓDOS LOCALIZADOS DO HIDROGÉNIO NO COMPOSTO  $Ti_{0.7}Zr_{0.2}CrH_3$ : ESTUDO POR ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE NEUTRONS LENTOS. José Nestnik Filho e Laetício Antonio Vinhas (Divisão de Física Nuclear, IPEN-CNEN/SP)

Os modos de vibração do átomo de hidrogênio, localizado em interstícios do composto ar matenador  $Ti_{0.7}Zr_{0.2}CrH_3$ , foram estudados através da técnica de espalhamento inelástico de neutrons lentos, utilizando-se o espectômetro de filtro de berílio-tempo de vôo do IPEN-CNEN/SP. Dos espectros obtidos foi possível identificar três picos com 50mev de largura total à meia altura nas energias de vibração de 85, 115 e 141mev. Para interpretar esse resultado juntamente com as intensidades dos picos, realizou-se uma análise para determinar os tipos diferentes de interstícios existentes no composto, ocupados por átomos de hidrogênio. Os interstícios são formados por quatro átomos metálicos arranjados segundo um tetraedro irregular: dois deles são Cr e Mn e os outros dois são provenientes da combinação ao acaso de Ti e Zr. Constatou-se que as três energias de vibração obtidas experimentalmente originam-se das três possíveis combinações dos átomos de Zr e Ti na formação dos interstícios. Como a natureza química dos átomos de Zr e Ti é semelhante, conclui-se também que as três energias observadas são decorrentes da diferença de tamanho desses dois átomos. A largura dos picos é dada principalmente à existência de três modos normais de vibração não degenerados para cada tipo de interstício.

MET/8:20/6A.F FONONS LOCALIZADOS EM SUPERFÍCIES METÁLICAS - A.S. CARRIÇO - Departamento de Física Teórica e Experimental - UFRN.

Fonons localizados em superfícies metálicas são examinados usando um modelo de força central restrito a primeiros vizinhos. São estudados particularmente os modos superficiais do Níquel que se acoplam com vibrações de Oxigênio adsorvido na superfície, responsáveis pela criação do momento dipolar superficial (modos com  $k = 0$  na camada adsorvida e polarizados perpendicularmente à superfície). Densidades de estados são calculadas em direções especiais da superfície Ni(111) usando funções de Green vibracionais obtidas pelo método da Matriz de Transferência. Os resultados reproduzem experiências com espalhamento de elétrons em superfícies de Níquel com cobertura parcial de Oxigênio e são consistentes com outros modelos teóricos.

MET/8:40/6A.F MODELO PARA ATENUAÇÃO ULTRASSÔNICA E CONSTANTE ELÁSTICA EM CRONO E CRONO-VANÁDIO. E.P. Castro, G.E. Marques, P.C. de Camargo (Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos).

Neste trabalho estudamos o efeito do ordenamento magnético e flutuação de spin na atenuação ultrassônica e constante elástica do cromo e suas ligas diluídas com vanádio. O processo de interação entre a onda elástica e o sistema magnético é tratado do ponto de vista termodinâmico e um modelo simples é introduzido para calcular o coeficiente de atenuação ultrassônica e a constante elástica perto da transição na temperatura de Neel. Esses valores calculados concordam com os valores experimentais. Concluimos que o comprimento de correlação de spin (ou constante de difusão) é o parâmetro que determina as diferenças drásticas entre o comportamento de atenuação no cromo puro e nas ligas<sup>(1)</sup>, e a ordem da transição<sup>(2)</sup>.

(1) CASTRO, E.P., CAMARGO, P.C. & BROTHMAN, P.B. Solid State Comm. 57, 37 (1986).

(2) FAVALT, E., ROBERTS, R.B., DAY, R. & white, g.t. Europhys. Lett. 1(9), 473 (1986).

**MET/9:00/6A.F** **RADIATIVA ANELÁSTICA REVISADA À INTERSTICIAIS NA LIGA Nb-50%Ti**  
Carlos Roberto Grandini (DPCU-UFSCar); Ofilia Florêncio (Universidade Estadual de  
Caratinga - PE); José de Anchieta Rodrigues (DEMA - UFSCar); Fábio Guerrini, Hiroshi  
Telma e José Alberto Rodrigues Jordão (DF - UFSCar).

Medidas de atrito interno têm-se mostrado uma ferramenta poderosa no estudo de defeitos puntuais em sólidos. Em particular, átomos de impurezas intersticiais(gases) em metais ou ligas b.c.c. costumam apresentar relaxações mecânicas conhecidas como efeito Snæk, que podem ser estudadas através de medidas de atrito interno. Os policristais de Nb-50% Ti em péso, foram submetidos sem qualquer tratamento térmico a medidas de atrito interno em um pendulo de torção de tipo "Ké" desde 150 K a 670 K. Posteriormente, as amostras foram tratadas térmicamente a 1050 K em forno com vácuo melhor que  $10^{-7}$  Torr sem que qualquer tratamento prévio tenha sido feito sobre a superfície das amostras. Após o tratamento térmico as amostras foram submetidas a medidas de atrito interno no mesmo intervalo de temperatura. Foi observada uma estrutura de relaxação que será interpretada com base nos resultados conhecidos das ligas Nb-Ti dopadas com N, C, H.(CNPq).

**MET/9:20/6A.F** **DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE DEFEITO DE EMPILHAMENTO, POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X,**  
**EM METAIS E LIGAS CPC.** Luis Gallego Martínez\* e Kengo Inukuma (Instituto de  
Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Descreve-se a implantação e automatização de um método para determinação da energia de defeito de empilhamento em metais e ligas CPC. Utilizando técnicas de Difração de Raios-X, determina-se a microtensão quadrática média e a probabilidade de defeito de empilhamento, determinando-se a partir destas grandezas a energia de defeito de empilhamento. O método implantado está sendo automatizado, desde a aquisição de dados até a análise de Fourier dos perfis de difração, com o uso de um microcomputador Apple II. Descreve-se ainda um critério para o ajuste do Background Linear dos perfis de difração.

\* Bolsista da Mestrado FAPESP.

**MET/9:40/6A.F** **ENERGIA DE PRECIPITAÇÃO NA LIGA Cu-Al-Ag (5,4% Al, 5,2% Ag)**  
A. T. Adorno (Instituto de Química de Araraquara-UNESP), M. Cileense (Instituto de Química de Ara-  
raquara-UNESP) e W. Gárlipp (Escola de Engenharia de São Carlos-USP)

Amostras da liga Cu-Al-Ag (5,4%Al, 5,2%Ag) foram laminadas e quente até uma espessura de 1,0 mm, temperadas a partir de 750°C e submetidas a um tratamento isocrônico de revenido durante uma hora, a várias temperaturas entre 350°C e 600°C, sendo cada uma das dez amostras utilizadas tratada a uma temperatura diferente. Foram efetuadas medidas de dureza nessas amostras e obtido um gráfico de variação de dureza com a temperatura de revenido. Foi também obtido um gráfico da influência da temperatura e do tempo de envelhecimento na dureza.

Os resultados sugerem uma forma analítica do tipo da equação de Johnson-Mehl para descrever o processo de crescimento do precipitado, que aumenta a dureza da liga. Isso permite estimar a energia de ativação do processo como sendo  $E_a = (120 \pm 14)$  kJ/mol.

Dados obtidos a partir de difração de raios-X da liga mostraram a presença de um composto de Ag-Al nas amostras recorridas e que não foi detectado acima de 700°C, o que parece reforçar a hipótese de que a precipitação de uma fase rica em prata aumenta a dureza da liga.

Na composição utilizada, a liga de Cu-Al-Ag parece estar próxima do limite entre as fases correspondentes ao cobre puro e a uma fase composta de cobre e prata, embora ela esteja localizada na região do cobre puro. O limite entre essas fases parece ser deslocado com a temperatura e a liga, no estado recorrido, fica dentro da região Cu + Ag e quando temperada acima de 700°C localiza-se na região correspondente ao cobre puro.

(CNPq)

MEI/10:15/6A.F ESTUDO DO EFEITO DA IMPLANTAÇÃO DE PARTICULAS A NOS COMPOSTOS FORMADOS EM AÇO 1020 IMPLANTADO COM NITROGÊNIO. S.M.N. Ramos, L. Amaral, A. Vasquez, M.T.X. Silva, F.C. Zawislak e M. Behar. Instituto de Física, UFRGS.

Neste trabalho estudamos, por meio de CEMS, o efeito da implantação de partículas a na formação e evolução térmica dos compostos formados em aço 1020 previamente implantado com nitrogênio.

A análise obtida preliminarmente no aço 1020 + N mostra a formação de carbôtos de fase e e o nitrete do tipo  $c\text{-Fe}_3\text{N}$  identificados com os parâmetros Mössbauer existentes na literatura, sendo que os espectros foram analisados a partir de temperatura de recocimento de 200 °C, quando algumas das fases iniciais já foram eliminadas.

No aço 1020 + N a observa-se uma contribuição significativa de compostos do C e ausência de compostos de N. Observa-se também que a evolução térmica dos compostos de C dá-se de forma mais lenta de modo que em 400 °C ainda temos presentes todos os compostos da fase inicial. Este comportamento sugere que os átomos de He inhibem o mecanismo de difusão de C na zona implantada. No entanto, a contribuição mais significativa de nossos resultados é a não formação de nitratos e carbonitritos quando da presença de átomos de He, cuja presença implica uma série de modificações na matriz de aço, conforme já descrito em literatura.

MEI/10:35/6A.F

#### INTERDIFUSÃO E REAÇÃO EM BICAMADAS Fe/Al I: Um estudo por RBS.

S.R.Teixeira, P.H.Dionisio, M.A.Z.Vasconcelos, W.Schreiner e I.J.R.Baumvol (UFRGS); E.P.da Silveira e P.L.Fraire Jr. (PUC-RJ)

São descritos os resultados da análise por Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS) dos processos de interdifusão e reação de fase sólida que ocorrem em bicamadas Fe/Al (1000 Å Fe, 3000 Å Al sobre silício oxido) quando submetidas a tratamento térmico em forno, mistura por bombardeamento iônico ("Ion Beam Mixing") e à combinação simultânea desses dois tipos de tratamento metalúrgico. Os resultados em forno indicam que a difusão de Fe em Al inicia em 570 K, tendo-se obtido duas difusividades:  $D_1 = 2.2 \times 10^{-17} \exp(-0.95 \text{ eV}/kT) \text{ cm}^2/\text{s}$  e  $D_2 = 1.7 \times 10^{-17} \exp(-0.33 \text{ eV}/kT) \text{ cm}^2/\text{s}$ . A difusão de Al em Fe ocorre a partir de temperaturas um pouco mais elevadas (~600 K) e é condição necessária para a ocorrência de reação com formação de uma fase intermetalíca. Estes resultados são confrontados com os obtidos para amostras submetidas a bombardeamento iônico.

MEI/10:35/6A.F

#### INTERDIFUSÃO E REAÇÃO EM BICAMADAS Fe/Al II: Resistividade da folha de amostras tratadas térmicamente em forno e bombardadas com faixas de ions.

S.R.Teixeira, P.H.Dionisio, M.A.Z.Vasconcelos, W.H.Schreiner e I.J.R.Baumvol (UFRGS); E.P. da Silveira (PUC-RJ).

Neste trabalho investigamos experimentalmente o processo de interdifusão e reações de fase sólida que ocorrem na bicamada Fe-Al, submetida a tratamento térmico em forno, mistura por bombardeamento com íons ("Ion Beam Mixing") e à combinação simultânea destes dois tipos de tratamentos metalúrgicos, através da caracterização elétrica. Os resultados das medidas de resistividade de folha permitem uma descrição qualitativa do processo de difusão e das transformações metalúrgicas do sistema Fe-Al que ocorrem por reação de fase sólida devido ao tratamento térmico. Imagens de microscópio eletrônico de varredura permitiram a observação das transformações estruturais superficiais nas condições de mudanças drásticas nos valores de resistividade de folha.

NET/10:25/6A.F

INTERDIFUSÃO E REAÇÃO EM BICAMADAS Fe/Al III: Identificação das fases formadas por tratamento térmico em forno e por mistura por bombardamento iônico.

S.R.Teixeira, P.H.Dionisio, M.A.Z.Vasconcelos, W.H.Schreiner e I.J.R.Baumvol (UFRGS); C.A.S.dos Santos (UFES).

Neste trabalho, procede-se à identificação das fases intermetálicas formadas por reação na fase sólida entre os componentes de bicamadas Fe/Al, quando submetidas a tratamento térmico em forno e a mistura por bombardamento iônico (Ion Beam Mixing). Como técnicas de análise, usaram-se a difração de Raios-X e a Espectroscopia Mössbauer de Eletrons de Conversão (CEMS). Nas experiências com forno, verificou-se a ocorrência de dois tipos de reação. Um ocorre a temperaturas desde 600 K até abaixo de 650 K e resulta na formação da  $Fe_3Al_5$ . Outro tipo de reação ocorre a partir de 650 K e resulta na formação da fase metastável  $FeAl_6$ . Alguns resultados preliminares com amostras tratadas por bombardamento iônico são interpretados em conexão com os resultados de forno.

NET/11:15/6A.F

### PURIFICAÇÃO ELETROLÍTICA DO NIÓBIO

Renato F. Jardim e Cláudio Santos - IRGW - DFESOM - UNICAMP

As impurezas substitucionais em uma matriz de Nióbio, Ta e W, não podem ser removidas por " fusão por zona", pois há evaporação preferencial do Nióbio, ocasionando um enriquecimento de Ta e W. Consequentemente, a " fusão por zona" necessita ser precedida por uma purificação química pela qual Ta e W podem ser removidos, sem enriquecimento essencial de outras impurezas metálicas.

Com este objetivo, escolhemos a eletrólise em sais fundidos por apresentar várias vantagens, entre elas, a de se obter o produto final no estado condensado, na forma compactada e com constituição praticamente constante.

São apresentados resultados metalográficos das amostras obtidas, bem como as determinações das impurezas obtidas pelo método de ativação de neutrons.

(Trabalho parcialmente financiado pela FAPESP)

NET/11:35/6A.F

UM ESTUDO MOSSBAUER DO METEORITO PUTINGA. J.C.P. de Oliveira (Departamento de Física - UFC), A. Vasquez (Instituto de Física - UFRGS), A. Roisenberg (Instituto de Geociências - UFRGS) e N. Vieira Jr. (Instituto de Geociências - UFRGS).

O meteorito Putinga, classificado como um condrito ordinário L6, foi objeto de estudo pela espectroscopia Mössbauer.

A amostra foi separada em duas frações: magnética e não-magnética. Os minerais da fração não-magnética, e suas quantidades, a partir das áreas relativas, foram determinados: olivina (39%), ortopiroxeno (29%), troilita (25%), taenita paramagnética (6%), e um composto desconhecido de  $Fe^{3+}$  (1%). A fração magnética mostra a presença de kamacita (75%) junto a minerais pertencentes à fração não-magnética (25%), em razão de não ter sido obtido o grau de liberalização ideal.

Os parâmetros Mössbauer foram determinados nas temperaturas de 300 K e 80 K para todos os constituintes do meteorito Putinga. Estes parâmetros concordam bem com os valores constantes na literatura.

E sugerido que o composto de  $Fe^{3+}$  tem origem na oxidação da amostra na atmosfera terrestre.

MET/11:55/6A.F | ANÁLISE POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DO METEÓRITO NOVA PETRÓPOLIS  
I. Souza Azevedo, R.B.Scorzelli, J.Danon (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas) e  
E.Zuccoloto (Observatório Nacional).

O meteorito Nova Petrópolis sofre um violento processo de oxidação. Observa-se uma curiosa sudação de um líquido esverdeado que se cristaliza na superfície em contato com o ar, provocando a formação excessivamente rápida de camadas de óxido superpostas em crostas facilmente removíveis. A análise Mössbauer de uma lamella natural muito pouco oxidata mostrou 15% de fase c magnética, 62% de fase  $\gamma$ -FeNi magnética rica em Ni, 20% de fase  $\gamma$  paramagnética (<30%Ni) e 3% de óxido de ferro. O espectro Mössbauer da crosta oxidata próxima a essa lamella apresenta parâmetros hiperfino correspondentes ao  $\gamma$ -FeOOH. O espectro Mössbauer da fase taenita ( $\gamma$ -FeNi, FCC) separada quimicamente revelou 72% de  $\gamma$ -FeNi desordenada, ~ 7% de FeNi 50/50 ordenada, 40% de  $\gamma$ -FeNi paramagnética e 27% de  $\gamma$ -FeOOH. O líquido que "brota" do metal exibiu à temperatura de 77K um espectro constituído de um dublete que não desdobra magneticamente à temperatura de 4.2K, atribuído ao cloreto ferroso.

**ÓTICA**

**Coord.: - Ricardo Francke (UFRGS)**

**OTI/8:00/4A.F** BI-ESTABILIDADE ÓTICA EM  $\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{+3}$ . Evarandro A. Gouveia (Universidade Federal de Alagoas), Tomas Catunda e Jardan C. Castro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

O aluminato de Gadolinio dopado com cromo apresenta um efeito foto-refrativo extremamente alto(1). A origem desse efeito está na diferença da polarizabilidade do íon  $\text{Cr}^{+3}$  nos estados fundamental e meta-estável ( $^4\text{E}$ ). O efeito foto-refrativo aparece portanto, quando à altas intensidades luminosas o estado meta-estável é populado e a polarizabilidade do íon  $\text{Cr}^{+3}$  é alterada. Fisicamente esse efeito pode ser descrito pela dependência do índice de refração com a intensidade  $n_0 \cdot n_2 I$  onde  $n_2$  é conhecido como índice de refração não linear. No caso do  $\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{+3}$  as medidas experimentais da  $n_2$  (1) e do efeito de conjugação de fase por mistura degenerada (2) quatro ondas (2), mostraram resultados bastante interessantes relacionados com o valor alto de  $n_2$  quando comparado com outros óxidos dopados com cromo. Neste trabalho estamos utilizando as propriedades não lineares do  $\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{+3}$  para realizar medidas de bi-estabilidade ótica. Na montagem experimental o cristal é colocado na cintura de uma cavidade plano focal. O fenômeno de bi-estabilidade ótica ocorre devido à mudança de caminho ótico da luz no interferômetro, e medida que o índice de refração do cristal muda, podendo o interferômetro se autocompensar, como descrito no modelo teórico para a bi-estabilidade ótica (3). Resultados preliminares já foram obtidos mostrando os ciclos de big terça características da bi-estabilidade. Medidas definitivas estão sendo realizadas.

(1) T. Catunda, J.P. Andreota & J.C. Castro. *Appl. Optics* 23, 2391 (1984).

(2) T. Catunda & J.C. Castro. "Phase Conjugation in  $\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{+3}$  and Ruby". Submetido ao *Optics Commun.* set/86.

(3) H.M. Gibbs. "Optical Bistability: Controlling Light with Light" ed. Academic Press, Inc (1985)

**OTI/8:20/4A.F** A FÍSICA DAS INSTABILIDADES ÓTICAS

A.G. Vicentini (Dept. de Física da PUC/RJ)

Foram estudadas as instabilidades que aparecem em biestabilidade ótica, através da análise da propagação de ondas num meio não linear. É sabido que uma onda propagante pode apresentar ganho paramétrico quando o meio se torna saturado, sendo este o motivo pelo qual os modos da cavidade podem ser amplificados e, consequentemente, produzir instabilidades. Com este método obtemos dados já conhecidos, como os pontos de bifurcação ótica, com a vantagem de garantirmos suas interpretações físicas. O método pode ser aplicado a instabilidades de lasers e o trabalho está em andamento, prevendo-se estudar a estatística do campo de emissão.

**OTI/8:40/4A.F**

DEPENDÊNCIA DOS ESPECTROS RAMAN E CONSTANTE DIELÉTRICA DO KDP COM A PRESSÃO UNIAXIAL - S.G.C.Moreira<sup>a</sup>, F.E.A.Melo, J.Mendes Filho, F.A. Germano e J.E.G.Moreira.

Estamos estudando a dependência dos espectros Raman e constante dieletrica do KDP com a pressão uniaxial, paralela e perpendicular ao eixo c, em várias temperaturas abaixo e acima da temperatura de transição ferroelétrica e paraelétrica ( $T_c = 122\text{K}$ ), com o objetivo de entendermos melhor a participação dos fôtons ópticos ativos no Raman nas transições de fase estruturais que acontecem no KDP em torno de 90K, 122K e 475K e os movimentos de mudança de sítios dos íons moleculares  $\text{PO}_4^{-3}$  durante estas transições.

<sup>a</sup>Departamento de Física da UFFA.

011/9:00/AA.F TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA ENTRE ÍONS DE Pr<sup>3+</sup> EM VIDROS BORATOS. Elio M. Pacheco e Cid B. de Araujo, Departamento de Física, UFPE, 50.000 Recife, PE.

Neste trabalho estudamos efeitos de transferência de energia em vidros boratos (0,7 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - 0,3 CaF<sub>2</sub>) contendo pequenas concentrações de Pr<sup>3+</sup> (0,3 a 5%). Nos vários casos investigados é excitada a transição  $^3H_4(1) \rightarrow ^3D_2$  do Pr<sup>3+</sup> para estudarmos a fluorescência ressonante  $^1D_2 \rightarrow ^3H_4$  e a fluorescência anti-Stokes correspondente à transição  $^3P_0 \rightarrow ^3H_4$ . Esta última resulta de um processo de conversão ascendente do qual participam simultaneamente dois fons de Pr<sup>3+</sup> (1). A fluorescência ressonante apresenta efeitos de estreitamento de linha para diferentes frequências de excitação dentro de lâmina inhomogênea  $^3H_4 \rightarrow ^1D_2$ . Por outro lado, a evolução temporal da fluorescência apresenta desvios em relação ao decaimento exponencial mesmo para amostras fracamente dopadas (1% de Pr<sup>3+</sup>). Estamos atualmente procurando caracterizar o potencial de interação entre os fons de Pr<sup>3+</sup> usando diferentes modelos existentes na literatura (2,3).

(1) R. Buisson e J.C. Vial, J. Phys. Lett. **42**, L115 (1981)

(2) V. Lupei, A. Lupei, S. Georgescu e C. Iodascu, Opt. Comm. **60**, 59 (1986)

(3) Laser Spectroscopy of Solids ed. por W.H. Yau e P.M. Salzman (Springer, 1981)

011/9:20/AA.F

ESTUDO ESPECTROSCÓPICO DE TÁLIO ATÔMICO PRODUZIDO POR EVAPORAÇÃO CATÓDICA.  
LÚCIA PRADO. (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Foram realizados estudos preliminares da linhas de emissão de lâmpadas de catodo oco de tálio preparadas em nosso laboratório. Estamos agora efetuando experiências envolvendo a espectroscopia de absorção dessas lâmpadas por intermédio do efeito optogalvânico. Para indução desse efeito estamos utilizando inicialmente fontes de luz convencionais, a fim de verificar a resposta do sistema no tocante à intensidade de sinal optogalvânico obtido e compará-lo com a resposta de uma lâmpada de catodo oco de cobre comercial submetida às mesmas condições de excitação. Com esses dados pretendemos analisar a viabilidade de se detectar o efeito optogalvânico em lâmpadas de tálio, induzido por excitação com laser pulsado.

011/9:40/AA.F

ESPALHAMENTO RAMAN A FREQUÊNCIAS MUITO BAIXAS EM VIDROS DE COMPOSIÇÃO 2Na<sub>2</sub>O-CaO-3SiO<sub>2</sub> COM MICROCRISTALITOS. Ervino Carlos Ziemath e Michel André Aerortegi. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

Submetidos a tratamento térmico apropriado, vidros com composição estequiométrica 2Na<sub>2</sub>O-CaO-3SiO<sub>2</sub>, nucleiam formando cristalitos esféricos com a mesma composição que a matriz vitrea. Efetuamos medidas de espalhamento Raman em amostras contendo diversos tamanhos de microcristalitos e observamos o aparecimento de um pico para freqüências Raman muito baixas. O máximo deste pico sofre deslocamento na freqüência com o inverso do tamanho dos cristalitos, e sua origem é atribuída aos modos vibracionais da superfície das partículas. Pesquisa subvencionada pela FAPESP, FINEP e CNPq.

011/10:15/4A.F ESPALHAMENTO RAMAN ROTACIONAL ESTIMULADO EM PARA-HIDROGÊNIO.  
Evaldo J. Corat, Vladimir Jesus Travá Airoldi (Instituto de Estudos Avançados -  
CTA, São José dos Campos, SP) e César C. Ghizoni (Instituto de Pesquisas Espa-  
ciais, São José dos Campos, SP).

A transição rotacional S(0) do para-hidrogênio tem se mostrado um bom sistema para estudo do espalhamento Raman estimulado, pois com o bombeamento por laser TEA de CO<sub>2</sub> obtém-se o primeiro deslocamento Stokes entre 13 e 17μm quase sem influência da geração da segunda Stokes, devido à dependência do ganho no inverso do comprimento de onda gerado, sem a geração da anti-Stokes, inibida quando o bombeamento é feito com radiação circularmente polarizada, e sem competição com outros efeitos não lineares, devido à baixa suscetibilidade destes no hidrogênio. Outro aspecto interessante é o fato do tempo de defasamento do meio ser relativamente grande, permitindo um estudo dos efeitos dos transitórios na geração, mesmo com a depleção da bomba.

Neste trabalho nós apresentamos os resultados experimentais e de simulação numérica de um gerador de radiação entre 13 e 17μm, pelo espalhamento Raman rotacional estimulado em para-hidrogênio, com bombeamento por laser de CO<sub>2</sub>. Estes resultados compreendem um método de obtenção do ganho de onda plana a partir das medidas experimentais, uma simulação numérica do processo levando em consideração o tempo de defasamento do meio, e uma avaliação do efeito da injeção de uma semente na freqüência Stokes para ser amplificada neste meio.

011/10:35/4A.F CONJUGAÇÃO DE FASE EM ÁTOMOS DE RYDBERG. Tomaz Catunda, Xaxa G. Cobato, Mônica Marcellos e Jarbas C. Castro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Nossa experiência visa o estudo de Conjugação de Fase por Mistura Degenerada de Quatro Ónadas (CFMD4O) em átomos de Na excitados (estados de Rydberg). Os átomos de Rydberg têm um comportamento muito peculiar com relação a sua interação com a radiação. Esta interação é muito mais intensa porque como o campo atômico é pequeno (o campo elétrico que liga o elétron excitado ao núcleo) a relação entre o campo de radiação e o campo atômico é muito maior. Este fato nos motivou a estudar pela primeira vez um efeito de ótica não linear em átomos de Rydberg. A preparação dos estados de Rydberg é feita através de dois lasers de corrente pulsada, um amarelo e o outro azul. O primeiro é sintonizado na linha D do Na (3S-3P) e o segundo pertence, numa transição do tipo 3P - n=9-11 (S ou D). Estes lasers de corrente são bombeados pelo 2º harmônico ( $\lambda = 532\text{nm}$ ) e 3º harmônico ( $\lambda = 355\text{nm}$ ) do laser Nd:YAG. O vapor de Na é produzido num forno de tipo "heat-pipe" que permite chegar até T=500°C (concentração de  $\sim 10^{16}\text{ átomos/cm}^3$ ). Atualmente estamos trabalhando na detecção dos átomos de Na no nível excitado n=10. Estamos usando o método de absorção óptica e o método de detecção termoionica ("space-chargediode method") que consiste em detectar uma alteração na corrente de um diodo termoionico devido à presença do átomo de Rydberg. Inicialmente pretendemos fazer a experiência do CFMD4O com o laser azul nas transições do tipo 3P - n=10. Posteriormente faremos esta experiência com o laser de CO<sub>2</sub> contínuo numa transição n=10 - n=13.

011/10:55/4A.F OTIMIZAÇÃO DA CONSTRUÇÃO DE CENTROS DE COR F<sub>A</sub>(II) EM CRISTAIS DE KCl:Li<sup>+</sup> UTILIZADOS COMO MEIO ATIVO DE LASER. Gernane Weahl Jr. e Máximo Sui Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Um exemplo típico de centro F<sub>A</sub>(II) é aquele que aparece na matriz de KCl impurificado com Li<sup>+</sup> acoplado a um centro F. Estes centros possuem propriedades óticas bastante favoráveis a obtenção do efeito laser, desde que o cristal seja mantido a baixa temperatura. Temos desenvolvido um laser que utiliza estes cristais de KCl:Li<sup>+</sup> com centros F<sub>A</sub>(II) como meio ativo, o qual é bombeado por um laser de Ar<sup>+</sup> na linha de 514 nm e com potência de 700 mW. A emissão no infravermelho se dá em 2,7μ. Os cristais são crescidos e coloridos em nossos laboratórios. A eficiência quântica do cristal depende da concentração de centros F<sub>A</sub>(II). Em concentrações altas há formação de agregados, em concentrações baixas o nº de fôtons absorvidos e emitidos é pequeno. Consequentemente estes dois fatores contribuem para um baixo ganho do meio ativo. Visando obter a máxima eficiência do laser, determinamos a concentração ótima de centros F<sub>A</sub>(II). Para obtenção desta optimização, operou-se o laser com cristais de diversas concentrações de centros F<sub>A</sub>(II). O ajuste da curva de potência de saída contra concentração de centros permite determinar a melhor concentração que foi de  $6,5 \times 10^7$  centros F<sub>A</sub>(II)/cm<sup>3</sup>. Com esta concentração a eficiência energética foi de 2,8% e o intervalo de sintonia obtido de 2,56 a 2,82 μm. O aumento da eficiência conseguido pela utilização de cristais com a concentração otimizada de centros F<sub>A</sub>(II), ampliou as perspectivas de aplicação do laser desenvolvido, em diversos problemas de espectroscopia. (FAPESP, CNPq, FINEP).

\* Endereço atual: CTA-IEAv - Divisão de Laser

**OTI/11:15/AA.F** EFEITO DA TEMPERATURA NO PROCESSO DE ALCARGAMENTO DAS TRANSIÇÕES RADIATIVAS NOS ORBITAIS E DO  $\text{Eu}^{3+}$  COMO DEFEITO EM CRYSTALS IÔNICOS. Guido M. Lopes e Jarbas C. Centro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Os efeitos não lineares nas transições radiativas em sólidos com defeitos, tem despertado bastante interesse nesses últimos 10 anos, particularmente a absorção de dois fôtons (TPA). Apesar da técnica TPA ter sido extensivamente empregada na Física Atômica, somente muito recentemente esta técnica foi utilizada com sucesso no estudo de terras raras ionizadas em cristais iônicos. No caso particular das transições  $4f^7(^5S_{1/2}) \rightarrow 4f^7(^5P_J)$  onde  $J = 3/2, 5/2, 7/2$ ; o decaimento pode ocorrer via uma mistura das funções de onda  $4f^7$  e  $4f^75d^0$ , sendo que este último estágio decai por um fôton. Em cristais iônicos com simetria  $O_h$  dopado com terra rara ionizado, o processo responsável para essa mistura deve ser fôtons ópticos longitudinais que destroem a simetria local do campo cristalino. Em halogenados alcalinos, tipo NaCl, KCl, etc a vacância sempre presente do lado do centro de cor, já quebra a simetria local do campo cristalino. Por esse motivo é de se esperar, conforme o modelo proposto, um comportamento bastante distinto de efeito de temperatura nas larguras de linhas de  $\text{Eu}^{3+}$  nos halogenados e fluoretos alcalinos. (CNPq, FINEP, FAPESP).

**OTI/11:35/AA.F** ESTUDOS DE AGLOMERADOS DE  $\text{OH}^-$  EM KCl USANDO DUAS TÉCNICAS: ITC (CORRENTE TERMOESTIMULADA) E EIVD (ESPECTROSCOPIA DE TRANSFORMADA DE FOURIER NO INFRAVERMELHO DISTANTE). Lígia de Oliveira e Máximo Sui Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Através destas duas técnicas experimentais podemos observar os modos de vibração e a relaxação dielétrica dos aglomerados de  $\text{OH}^-$  em KCl. Em trabalhos prévios foi observado através de medida de perda dielétrica, picos de relaxação em 66E (pico A), 11,2K (pico B), 3,9K (pico C), e uma frq. quântica de  $4 \times 10^9$  Hz. Com estas medidas e utilizando o valor de tempo de relaxação no pico, da amostra KCl:Ca<sup>2+</sup>, obtido pela corrente termoestimulada, podemos estimar uma temperatura (38K) de ocorrência do pico A no método do ITC. Nosso interesse é a observação deste pico A, pois este é o que mais se aproxima às condições necessárias as quais nos permitem verificar o seu comportamento e medir a relaxação dielétrica através da corrente de despolarização termoestimulada acompanhada também de medidas de absorção ótica.

#### Referência

R.C. Potter & A.C. Anderson. Phys. Rev. B 24, 677 (1981).

**OTI/11:55/AA.F** CARACTERIZAÇÃO DO ESTADO IÔNICO  $f^0(^3P_0)$  DA MOLECULA DE IODO COM TÉCNICA DE DUPLA RESSONÂNCIA. Janir S. Hickmann, Eliane Fernandes, Helena Libardi e Ricardo E. Francke. (Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul)

Os estados iônicos da molécula de iodo são de interesse fundamental, já que sua curva de potencial pode ser estudada com grande detalhe, devido a seu elevado peso molecular. Também são de interesse prático porque alguns deles estão envolvidos em transições lasers. O desenvolvimento da técnica de dupla ressonância com lasers estimulou muitos trabalhos nesta área. Em nosso laboratório foi descoberto que laser de nitrogênio (337 nm) tem ressonâncias acidentais entre o estado  $B3^+$  e um desses estados iônicos: o estado  $f^0(^3P_0)$ . Este fato abre diversas possibilidades experimentais, já que estes experimentos combinam a seletividade da técnica de dupla ressonância, com a alta potência característica de lasers moleculares de freqüência fixa.

No presente trabalho, foram identificadas algumas linhas do laser de nitrogênio responsáveis pelas ressonâncias acidentais, bem como os números quânticos das transições correspondentes induzidas na molécula de iodo. Como um exemplo, mencionamos que a linha  $P_2(7)$  do laser de nitrogênio induz a transição ( $v_i - v_f$ ) (2-16)  $P(30)$  no iodo. A identificação de algumas destas ressonâncias permitiu resolver uma discrepância na literatura sobre as constantes espectroscópicas do estado  $f^0(^3P_0)$ , o qual era descrito por dois conjuntos de constantes incompatíveis entre si.

**OTI/8:00/5A.F** RECOBRIMENTOS ÓPTICOS: TRATAMENTOS PRE-DEPOSIÇÃO. Roberto M.  
de Agosto e Flavio Horowitz (Instituto de Física da UFRGS - 90049 Porto Alegre, RS)

A confecção de filmes finos com boa aderência e qualidade óptica durável pressupõe substratos isentos de defeitos mecânicos e contaminação. Neste sentido, foi instalado no setor de deposição de filmes, com pressão positiva, um sistema para controle de temperatura, umidade e filtragem de partículas de até 5  $\mu\text{m}$  (podendo ser estendida para frações de  $\mu\text{m}$ ).

Previamente à deposição, os substratos de boa conformação mecânica devem passar por um processo de descontaminação, cuja sistemática deverá resultar da avaliação comparativa das seguintes técnicas: banhos em detergentes suaves, álcool isopropílico (líquido/vapor), jato de freon e  $\text{CO}_2$ , seguidos de exposição a ozônio + luz UV ou íons  $\text{O}^-$ .

Está em andamento a construção de um microambiente limpo em que a seleção de materiais é crítica devido à alta capacidade solvente do freon. Para a avaliação de qualidade estão previstos a contagem de partículas filtradas no microambiente, testes de simulação da influência ambiental, medidas de espalhamento de luz e ellipsometria de superfícies.

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

**OTI/8:20/5A.F** LITOGRÁFIA ÓPTICA SUB-NÍCROM

Geraldo F. Mendes, Lucília B. Cesario, Jaime Freijlich  
Universidade Estadual de Campinas

Desenvolveu-se no laboratório uma técnica puramente óptica que permite o registro em filmes de fotoresinas de estruturas periódicas (redes) com linhas de largura menor que 1  $\mu\text{m}$  e definição comparável ou melhor que a que pode ser obtida com electron beam.

Essa tecnologia foi desenvolvida visando a transferência desses padrões periódicos para o substrato (vídeo ou semicondutores) quando o filme de fotoresina como máscara. As aplicações imediatas são: fabricação de componentes holográficos, laser semicondutor de tipo DFB e óptica integrada em geral.

**OTI/8:40/5A.F** ESTABILIZAÇÃO DE LASER DE Ne-Ne ATRAVÉS DE EFEITO ZEEMAN. Carlos A. Rassazzo,  
Luciano da P. Costa e Sérgio C. Zilio (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Estamos estabilizando um laser de Ne-Ne nacional, tipo solo duro, usando o batimento devido ao efeito Zeeman provocado por um campo magnético externo nas linhas do neônio. A frequência de batimento depende do tamanho da cavidade e é mínima quando um dos modos do resonador estiver no centro da curva de ganho do meio ativo<sup>(1)</sup>. O batimento é produzido por um campo de 50G, gerado por um solenóide envolvendo o tubo, e sua frequência é convertida em sinal de erro através de um sistema digital composto de Schmitt trigger, contador reversível, transfer gate, buffer memory e conversor D/A. O sinal de erro alimenta um PZT e um aquecedor que estabilizem o tamanho da cavidade e consequentemente a frequência de saída do laser. (CNPq, FAPESP).

(1) T. Sze, F.V. Kowalski & J.L. Hall, Appl. Opt. 19, 3173 (1980).

**OTI/9:00/5A.F** ESPECTROSCOPIA INTRACAVIDADE COM UM LASER DE CENTRO DE COR NA REGIÃO DE 2,7 $\mu$ m.

**GERMANO WOEHL JR.<sup>a</sup> e MÁXIMO SIU LI - IFQSC- USP.**

Realizamos medidas de absorção de uma amostra colocada intracavidade de um laser de centro de cor inteiramente desenvolvido no IFQSC<sup>\*\*</sup>, que utiliza como meio ativo um cristal de KCl:Li<sup>+</sup> com centros F<sub>A</sub>(II), que também foi crescido e preparado nas dependências deste Instituto. A amostra que utilizamos foi um cristal de KCl impurificado com NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e Li<sup>+</sup>, a qual apresenta um pico de absorção em 2,714 $\mu$ m. Este pico situa-se dentro do intervalo de sintonia do laser. Com esta técnica de espectroscopia obtivemos uma amplificação de 50 vezes na medida de absorção. Uma possível causa desse fator de amplificação deve-se a competição de modos, uma vez que a sintonia do laser foi feita com um prisma, o qual permite a oscilação simultânea de multimodos.

\* Atualmente no CTA-IEAv-Divisão de Lasers

\*\* Revista de Física Aplicada e Instrumentação Vol. 1 nº 4

Apoio Financeiro: FAPESP, FINEP e CNPq

**OTI/9:20/5A.F** CARACTERÍSTICAS DA EMISSÃO DE UM LASER DE N<sub>2</sub> DE BAIXA PRESSÃO EM FUNÇÃO DE PARÂMETROS DO CIRCUITO DE DESCARGA-SEGUNDA PARTE. H. Brito Fernandes Filho, A. Dias Tavares Jr. e C. A. Massone, Laboratório de Espectroscopia e Laser, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, CP 296, Niterói, 24210 RJ.

Foi apresentado anteriormente (1-2) um estudo sobre a influência nas características do pulso de emissão (potência de pico, energia e largura temporal) de um laser de N<sub>2</sub> de baixa pressão, de alguns parâmetros do circuito excitador. Se apresenta agora um panorama completo da influência destes fatores onde se tem estudado a posição do "spark-gap" em relação ao canal de descarga, geometria dos eletrodos, distância intereletrodica, comprimento do canal de descarga e frequência de ressonância do circuito excitador. Os resultados mostram que, para um dado modelo de laser, as características do pulso laser emitido podem ser modificadas em até uns 50% com pequenas e simples modificações no circuito excitador.

Trabalho parcialmente financiado por FINEP e CNPq

- 1.- H. da Silva Reis, A. Dias Tavares Jr., C. A. Massone e H. S. Z. Chagat, J. of Physics E 19, 471 (1986)
- 2.- H. Mendes Alves, A. Dias Tavares Jr. e C. A. Massone, IX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, OTI-22, (1986).

**OTI/9:40/5A.F** CERAÇÃO DE RADIAÇÃO SINTONIZÁVEL NO INFRAVERMELHO LONGÍNUO A PARTIR DE MISTURA DE FREQUÊNCIAS. Elza C. Cruz Vasconcellos ( Inst. de Física - DQ - UNICAMP ).

O estudo da espectroscopia a laser na região do infravermelho longínuo (IVL), do espectro eletromagnético tem sido prejudicado pela falta de fonte de radiação sintonizável nessa região. O desenvolvimento de lasers à gás, principalmente os bombeados esticamente tem estimulado pesquisas espectroscópicas na região IVL<sup>(1)</sup>. Existem presentemente cerca de 100 linhas intensas na faixa de 100 à 600 $\mu$ m, mas ainda a sintonização destes lasers é pequena e a espectroscopia possível se restringe ao estudo de linhas de absorção com frequências muito próximas das frequências das linhas disponíveis de laser.

Propomos construir uma fonte IVL sintonizável a partir da soma (ou subtração) de radiação de microondas sintonizável, com radiação laser IVL disponível. A mistura dessas frequências de radiação será feita em diodos de contato de ponta, MIS(Metal-Isolante-Metal) ou Schottky.

Em princípio será possível conseguir-se uma varredura na região espectral de 0.5THz à 4THz(600 $\mu$ m à 75 $\mu$ m ).

(1) Técnica de Ressonância Magnética com Laser (LMR)

071/10:15/5A.F ABSORÇÃO DE DOIS FOTONS POR PARES DE ÁTOMOS. L. Acioli, A.S.L. Gomes, J.R. Rios Leite e Cid B. de Araujo. Departamento de Física - UFPE.

Discutiremos resultados teóricos para as formas de linha espectral da absorção de dois fôtons por pares de átomos de dois e três níveis quânticos extendendo resultados obtidos previamente (1). Será discutida a conexão dos modelos estudados com experimentos realizados em sólidos (2) e vapores atômicos (3). Novos efeitos previstos nos cálculos serão analisados com vistas a futuros experimentos.

- (1) J.R. Rios Leite e Cid B. de Araujo, Chem. Phys. Lett. 73, 71 (1980); A.S.L. Gomes, Tese de Mestrado - UFPE (1982)
- (2) J.C. Vial e R. Buisson, J. Phys. Lett. 43, L745 (1982); R. Buisson, J.Q. Liu e J.C. Vial, J. Physique 45, 1533 (1984)
- (3) J.C. White, Opt. Lett. 6, 242 (1981).

071/10:35/5A.F ESTUDO DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DE UM OSCILADOR DE VAN DER POL

Andrea Regina Zeni e Jason Alfredo Carlson Gallas,  
Departamento de Física da UFSC, 88049 Florianópolis.

Seguindo uma sugestão de Jorge A Lisboa (IF-UFGS), investigamos numericamente o comportamento de um oscilador não-linear de van der Pol excitado por uma força externa periódica. O objetivo é identificar a natureza de certas oscilações, aparentemente auto-induzidas, em transmissores de rádio.

(Parcialmente financiado pelo CNPq, CAPES e FINEP)

071/10:55/5A.F ABSORÇÃO DE RAIOS X EM ÁTOMOS NA PRESENÇA DE CAMPOS INTENSOS DE LASERS NA APROXIMAÇÃO DE SELBY-HARRIS, A. L. A. FONSECA e A. C. M. OLIVEIRA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA - UnB- 70910, BRASÍLIA-DF

A absorção de Raios X no átomo de Hidrogênio na presença de campos intensos de lasers é estudada utilizando-se a aproximação de Selby e Harris da Física de Plasmas. Esta aproximação de campo intenso nos possibilita a determinação direta e simples da seção de choque  $\sigma_x$  sem a necessidade da expansão em séries de potência ou soluções assintóticas gráficas usuais. Encontramos que  $\sigma_x$  varia com  $\epsilon^{-1}$  ( $\epsilon$  é proporcional à amplitude do laser) no regime de campos intensos e com  $\epsilon^{-1/2}$  no limite de campos super intensos.

**071/11:15/5A.F** CONSIDERAÇÕES PARA A REALIZAÇÃO DE UM ESTADO SUB-POISSONIANO DO CAMPO ELETROMAGNÉTICO

Geraldo A. Barbosa e Miguel Tostes Ribeiro

Departamento de Física - ICEx - UFGC

O próximo século poderá ser o "Século da Luz", seja pelo impacto das comunicações ópticas, seja por sistemas ópticos de medida altamente sofisticados ou por inúmeras outras possibilidades geradas pelos estudos sobre a natureza da Luz e suas potencialidades práticas.

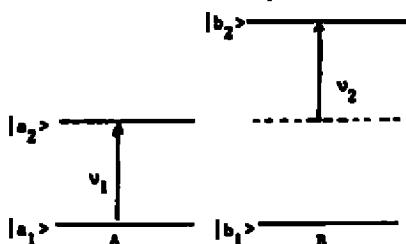
O portador ideal de sinal deve ter o menor ruído intrínseco possível, sendo o laser a fonte de luz usual com menor ruído que se conhece ( $\langle (\Delta n)^2 \rangle \geq \langle n \rangle$ ). A criação de estados de campo com estatística de número sub-poissoniana ( $\langle (\Delta n)^2 \rangle < \langle n \rangle$ ) deverá ser objeto de considerável atenção nos próximos anos.

Estamos sugerindo e estendendo a possibilidade de realização de um estado sub-poissonianismo do campo através de seguinte sistema: inicialmente, um laser ( $\lambda_0 = 613\text{nm}$ ) gera luminescência paramétrica num cristal de KDP onde selecionamos os feixes conjugados  $\lambda_1 = 6322\text{nm}$  e  $\lambda_2 = 6230\text{nm}$ . Estes feixes incidem numa estrutura de  $\text{Ga-AlGaAs (MQW)}$  localizada numa cavidade Fabri-Perot. O primeiro nível excitônico da MQW situa-se em  $\sim \lambda_2$ . A cavidade é sincronizada para passagem de feixe  $\lambda_1$ . As flutuações de número, idênticas nos dois feixes, poderão provocar variações na transmissividade da cavidade, em sentido inverso ao da variação de número, por efeitos não-lineares no "Oscillator Straight" dos excitões. A estatística do feixe original  $\lambda_1$  será modificada e deverá resultar num feixe transmitido com ( $\langle (\Delta n_1)^2 \rangle < \langle n_1 \rangle$ ).

(Ver também seção de painéis)

**071/11:35/5A.F** TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA INDUZIDA POR UM FÓTON. J.L. Duarte e Jordan C. Casagno Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

A transferência de energia entre íons em um sólido ocorre devido à interação entre os mesmos e permite que um íon A quando excitado para determinados níveis transfira a sua energia para o íon B indo o íon A para um nível de energia mais baixa e o íon B para um nível mais alto. A proposta deste trabalho é estudar um mecanismo de transferência de energia diferente dos observados em sólidos, em que a transferência é induzida por um segundo fóton, como ilustrado na figura abaixo. Neste processo o doador A é levado a um estado  $|a_2\rangle$  através da absorção de um fóton de frequência  $v_1$  e então o sistema (A+B) absorve um segundo fóton de frequência  $v_2$ , levando o íon B para o estado  $|b_2\rangle$  e o íon A para o estado fundamental  $|a_1\rangle$ . O sistema em estudo é o cristal de alumínio de gadolinio dopado com cromo ( $\text{GdAlO}_3:\text{Cr}^{+3}$ ), onde o íon A é o  $\text{Cr}^{+3}$  e o íon B o  $\text{Gd}^{+3}$ .

\*Fundação Universidade  
Estadual de Londrina**071/11:55/5A.F**

## ABSORÇÃO MULTIPOTÔNICA RESONANTE EM CRISTAIS

Cinette Jalbert, Balita Koller, H.S. Brandi e N.Zagury (Dept. Física - PUC/RJ)

Utiliza-se o método das "bandas vestidas" para estudar o efeito de estados intermediários nas transições multipotônicas em um cristal. A probabilidade de transição é sensível a ressonâncias de estados intermediários e é fortemente afetada pela intensidade do laser.

011/8:00/6A.F

EFEITO OPTOCALVÂNICO INDUZIDO POR LÂMPADA DE CATODO VACUO. Armando Mirage,  
(Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Descrevemos uma experiência onde foram feitas medidas de sinal optogalvânico observado nas condições seguintes: a) Circuito detetor contendo uma lâmpada de catodo vazio de cobre-neônio, de baixa corrente; b) Excitação feita pela luz de uma segunda lâmpada de cobre-argônio, de alta corrente. Os resultados dessas medidas mostraram que o sinal é uma função linear da intensidade da luz excitante, o que sugere a possibilidade de utilização desse esquema para a construção de equipamento para análise de materiais.

011/8:20/6A.F

DESENVOLVIMENTO DE UMA CÂMERA PARA HOLOGRAFIA.

José J. Lunazzi - UNICAMP

Dentro do projeto PADCT-Instrumentação-CNPq estão sendo desenvolvidas componentes nacionais para uma câmera holográfica, de maneira a somente depender da fonte luminosa (laser) e do filme holográfico.

Os primeiros componentes desenvolvidos são: um obturador remoto para laser e um fotômetro. Estão em fase de preparo os suportes mecânicos, a mesa, filtros especiais, espelhos e o divisor de feixes. Serão apresentados os primeiros protótipos já construídos, descrevendo suas características.

011/8:40/6A.F

HOLOGRAFIA INTERFEROMÉTRICA EM TEMPO REAL UTILIZANDO CRISTAIS FOTORREFRATIVOS

Paulo A.M. dos Santos - Jaime Frejlich

Universidade Federal Fluminense - Universidade Estadual de Campinas

A ação combinada da fotocondutividade e do efeito elstroóptico linear em cristais fotorrefrativos resulta numa modulação do índice de refração que permite desta forma realizar registros em tempo real nestes materiais.

Os cristais da família do  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  são normalmente isotrópicos mas sob ação de luz e consequente modulação do índice de refração adquirem características anisotrópicas. Um holograma assim registrado produz diferenças notáveis nas direções de polarização dos feixes transmitido e difratado durante a leitura. Esse fenômeno chamado de difração anisotrópica, permite a reconstrução de hologramas em tempo real de maneira muito simples, mesmo para materiais com baixíssima eficiência de difração.

Como exemplo de aplicação desta técnica, apresentamos o estudo dos modos de vibração de um alto-falante, através de técnicas de holografia interferométrica, utilizando como material de registro o cristal  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ .

OTI/9:00/6A.F

**DETECTORES PIEZOLETRICOS PARA RADIAÇÃO ELETROMAGNETICA.** Celso Xavier Cardoso e Michel André Agresta. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

Apresentaremos um estudo sistemático da resposta de detectores de radiação eletromagnética desenvolvidos a partir de cerâmicas PZT nacionais e estrangeiras, tais como influência da área dos eletrodos, espessura do detector, resposta em energia, em frequência, em potência, efeitos geométricos, etc. Esses detectores são simples, baratos, relativamente sensíveis (até 2V/V) e podem ser usados numa larga faixa espectral e com várias configurações geométricas (simples, duplas, quadrantes, etc). Pesquisa subvencionada pelo CNPq/FAPESP.

OTI/9:20/6A.F

**TRANSMISSÃO DE IMAGENS ATRAVÉS DE FIBRAS, POR MEIOS PURAMENTE ÓPTICOS.** J. Calatroni - Universidad "Simón Bolívar" Departamento de Física, Caracas, Venezuela, A.A. Tagliaferri, J. Nagai e C.C. Lopes - Universidade Federal Fluminense, Instituto de Física, Niterói, RJ, Brasil. As fibras ópticas podem ser utilizadas como canais para transmitir sinais ópticos, ou seja, imagens. Para sua utilização é necessário proceder a uma adaptação do sinal com a fibra. Isto pode ser feito por meios puramente ópticos, sem etapas eletrônicas, utilizando as técnicas da codificação cronística. Isto é utilizado com êxito na transmissão de imagens 2-D ou 3-D através de uma única fibra ou de linhas de fibras. No caso da transmissão de uma imagem 2-D por uma única fibra, é necessária uma amostragem da imagem e existe por tanto uma perda de informação. Um aumento do número de fibras permite uma freqüência de amostragem maior e por tanto um aumento no número de pontos transmitidos. Apresentamos algumas resultados obtidos.

OTI/9:40/6A.F

"MEDIDAS DE ESPECTRO E CAMPO PRÓXIMO EM TEMPO REAL PARA LASERS SEMICONDUTORES". - Rubens do Amaral Neto - CPqD-TELEBRAS, C.P.1579, Campinas-SP CEP 13085.

O estudo do comportamento do espectro óptico da emissão para lasers semicondutores em função da sua corrente de polarização é de muito interesse para sistemas de comunicações ópticas. Com uma montagem relativamente simples podemos observar simultaneamente o espectro e o campo próximo dos lasers em um monitor de vídeo, o que pode ser então relacionado a outros parâmetros dependentes da corrente de polarização. Alguns dos principais efeitos observados são: a) mudanças de ordem de modo transversal para lasers de contacto largo ( $18\mu m$  por exemplo) e as suas consequências no espectro de emissão; b) a grandeza  $\Delta p/\Delta I_p$  ( $\Delta p$ : comprimento de onda do máximo da emissão;  $I_p$ : corrente de polarização) atinge valores positivos ou negativos para lasers aparentemente idênticos e para certos lasers essa grandeza muda de sinal em uma particular corrente; c) instabilidades do tipo competição de modos longitudinais que foram associadas a fortes limitações na resposta em frequência nas respectivas correntes de polarização; d) alargamento súbito das modos longitudinais a ponto de misturá-los, que foram associados a instabilidades do modo transversal decorrentes geralmente de campos de tensão mecânico na região ativa mais altos que normal.

011/10:15/6A.F

**- REALIMENTAÇÃO ÓPTICA ENTRE LASER SEMICONDUTOR E FIBRA MONOMODO -**  
Ildefonso Felix de Faria Jr., Felipe R. Barbosa - CPqD-TELEBRÁS -  
Campinas.

A qualidade do acoplamento laser-fibra não pode ser considerada apenas em termos da sua eficiência. Devemos também considerar a realimentação óptica devida a reflexões nas extremidades da fibra. Este efeito é responsável tanto pela modulação na amplitude da luz acoplada, como por ruído espectral em enlaces de linha óptica.

Neste trabalho analisamos as flutuações de intensidade na fibra e alterações no espectro do laser. Este estudo é feito para diferentes geometrias de microlenzes. Procuramos diminuir a realimentação sem comprometer a eficiência de acoplamento. Fazemos um estudo da tolerância aos deslocamentos x,y,z,θ da fibra com relação ao eixo óptico do laser.

011/10:35/6A.F

**ESPECTROMETRO ÓPTICO PARA ESTUDO DE PERFIS DE LINHAS ESPECTRAIS**

José Alberto C.L.Ribeiro (Fundação Brasileira para o Desenvolvimento do Ensino de Ciências) e Roberto I.G.Fornari (Instituto de Física-Universidade de São Paulo).

Um espectrometro óptico de rede de difração em atenja Czerny-Turner, foi construído para o estudo da temperatura ionica de plasmas a partir da medida do alongamento Doppler de linhas espectrais de impurezas. O espectrometro tem distância focal de 1500 mm e utiliza uma rede holográfica de 3600 l/mm. Foram calculados os efeitos das superfícies ópticas sobre o desempenho do aparelho. Utilizando uma lâmpada de mercúrio e um laser de He-Ne, determinou-se a forma da função de aparelho, obtendo-se uma largura instrumental de ordens de 0,06 Å em 2-3100 Å. Visando melhorar a resolução do espectrometro estuda-se, no momento, o efeito da introdução de assimetrias no sistema óptico, as quais devem permitir reduzir a abertura de cone, que é a mais importante neste tipo de espectrometro. Estuda-se ainda o efeito de diversos tipos de máscaras de spedição sobre a forma da função de aparelho.

011/10:55/6A.F

**ANALISE DA RESOLUÇÃO DO ESPECTRÔMETRO ACÚSTICO - ÓPTICO**

José Edimil Barbosa Oliveira

Divisão de Engenharia Eletrônica, IIEC-ITA-CTA

São José dos Campos - S.P.

A aplicação da difração acústico-óptica para analisar a composição espectral de radiação tem se revelado extremamente atrativo quando comparado com as técnicas convencionais. Isto se deve ao fato que a espectroscopia acústico-óptica permite realizar sintonia com elevadas velocidade de varredura, largura angular e resolução. Neste trabalho apresentamos uma análise detalhada da resolução obtida com espectrômetros que utilizam cristal de quartzo. As situações experimentais que estão sendo investigadas no ITA também são relatadas. Na análise da resolução são levadas em consideração as anisotropias óptica e acústica, a dispersão óptica do meio e a geometria da coluna acústica. Mostra-se que um aumento da velocidade de varredura espectral gera uma redução na resolução do espectrometro. Configurações de espectrômetros que geram resolução de ordem de  $10^4$  são especificadas.

**OTI/11:15/6A.F** **ACOPLAMENTO DE MODOS DE FORMA PASSIVA EM LASER DE CORANTE PARA OBSTENÇÃO DE PULSOS ULTRACURTOS.** Luis Felipe Lorenzoni de Oliveira e Alvin Elliot Kiel. Depto. Eletrônica Quântica, Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas.

Utilizamos um laser de corante, com cavidade linear, com uma solução de  $10^{-4}$  M de Rodamina 6G em metanol, bombeado por lâmpada flash, onde obtivemos emissão na faixa de 565 a 630 nm de pulsos com duração de 1 microsegundo e uma largura de linha de 1,6 Å. Introduzimos uma cela, contendo uma solução de DODCI (3,3' dietiloxadicarbocianina iodado) em etanol, com um caminho óptico de 1m. As paredes externas de suas janelas estavam revestidas por filme anti-refletor, para evitar perdas por reflexão da ordem de 8%. Nas paredes internas, a interface vidro-solvente provocará reflexão de apenas 1%, não necessitando de revestimento. Foi feita a recirculação do DODCI através de uma bomba de sucção simples.

O DODCI possui características de transmissão não-lineares: para alta intensidade incidente ocorre a saturação do meio e consequentemente alta transmissão, e para baixa ocorre pequena transmissão, assim sendo o chamado de absorvedor saturável.

Situamos a cela a 4 cm do espelho 100% refletor e aumentamos paulatinamente a concentração, e observamos o seguinte. Há estreitamento da largura temporal dos pulsos, em  $4,6 \cdot 10^{-10}$  s conseguimos uma duração temporal de 80 ns. Há deslocamento do pico da banda de emissão para o vermelho, pois tínhamos o pico em 595 nm e passamos a ter em 610 nm.

Notamos que há muita instabilidade na emissão, fato advindo da fluência (energia do pulso/seção reta irradiada) do pulso ser menor que a fluência de saturação do absorvedor, não sendo suficiente para saturá-lo. Portanto necessito focalizar o feixe na cela do absorvedor para poder haver a plena modulação das perdas e assim obter o pulso ultracurto desejado, que é da ordem de 3 ps.

Devo ainda situar a cela numa posição precisa dentro da cavidade, para que o pulso quando nela chegue pela segunda vez, o absorvedor já esteja relaxado e pronto para um novo cheavamento.

**OTI/11:35/6A.F** **PROCESSOS DE COMPRESSÃO INTRA-CAVIDADE DE PULSOS LASER ULTRA-CURTOS.** Rubens S. Miranda, Carlos H. Brito Cruz e Marco A.F. Scarparo, Depto. de Eletrônica Quântica, IFGW-UNICAMP.

Este trabalho tem como objetivo o estudo, através de uma simulação numérica, processos de compressão de pulsos em lasers de cavidade em anel, operando em regime de acoplamentos de modos com pulsos contrapropagantes. A combinação dos efeitos de auto-modulação de fase e dispersão que ocorrem em lasers deste tipo é estudada analisando a contribuição destes ao perfil do pulso durante a propagação na cavidade. (trabalho em andamento).

**OTI/PAINEL** "PROJETO DE DIODO ELETROLUMINESCENTE EM LIGA QUATERNÁRIA  $In_xGa_{1-x}As$ "  
SOBRE InP". - Felipe R. Barbosa - CPqD-TELEBRÁS, 13.085-Campinas - SP.

A chamada para dispositivos eletroluminescentes de emissão em  $1,3\mu m$  é devida à excelente transmissão de sinal em fibras óticas monomodo nesse comprimento de onda. Apresentamos o projeto de um diodo eletroluminescente (LED), emitindo nessa faixa de  $1,28\text{--}1,32\mu m$ . Para o projeto são consideradas a dopagem da região ativa e camadas confinantes, composição  $In_{1-x}Ga_xAsyP_{1-y}$  e espessuras das várias camadas.

São discutidas também a geometria do dispositivo, a influência de mecanismos de recombinação interfacial, e a otimização da eficiência e da banda passante desse LED.

**OTI/PAINEL** LASER DE CENTRO DE COR SINTONIZÁVEL NO INFRAREMELHO PRÓXIMO. Ricardo A.B. da Costa e Maximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP)

Foi construído um laser de centro de cor (LCC) que utiliza como meio ativo um cristal de  $KCl + 12\% LiCl$  com centros  $F_A(II)$ . O processo de criação de centros  $F_A(II)$  é feito através da fotoconversão de centros F em  $F_A(II)$ . A cavidade ótica do LCC é formada por 3 espelhos, que junto com o meio ativo formam uma cavidade astigmaticamente compensada. O espelho de entrada é um manisco onde a superfície côncava é altamente reflectiva para  $2,7\mu m$  e altamente transparente para  $514 nm$ , o espelho central é um espelho de prata altamente reflectivo e o espelho de saída é parcialmente transparente, 5%, para  $2,7\mu m$ . O LCC é bombeado por um laser de Ar\* em  $514 nm$ , obtendo-se, através de um prisma de safira como meio dispersivo, um intervalo de sintonia de  $2,50$  a  $2,85\mu m$ . Bombando o LCC com o laser de Ar\* em regime de multilibras, obteve-se eficiência de 0,14% com um limiar de excitação de  $275 mW$ . O feixe do LCC tem características de modo  $TEM_{00}$  e sua divergência está em torno de  $3,5 mrad$ .

**OTI/PAINEL** ESPALHAMENTO DE MIE POR ESFERAS RUGOSAS. S.L.Cesar,E.F.Vasconcelos e G.A.Farias. Departamento de Física, UFC - Fortaleza, Ceará-60.000.

Estudamos o espalhamento de Mie por uma esfera que apresenta uma rugosidade aleatória. Consideramos a rugosidade pequena, de modo que os campos elétrico e magnético sejam calculados por teoria de perturbação.

Calculamos a energia total espalhada, a seção de choque de espalhamento e analisamos a mistura das paridades nas funções esféricas devido à rugosidade.

**DTI/PAINEL****ALARGAMENTO ESPECTRAL DE PULSOS LASER INTENSOS EM FIBRAS ÓPTICAS**Tânia V. Cardoso, Hugo L. Fragnito, Alvin Kiel e C. H. Brito Cruz  
UNICAMP - INSTITUTO DE FÍSICA/DEQ

Quando um pulso de luz intenso se propaga em uma fibra óptica, sua frequência instantânea é deslocada para o vermelho e o azul, na frente e na cauda do pulso, respectivamente. Este fenômeno, chamado auto-modulação de fase (AMF), é devido à dependência do índice de refração com a intensidade. A ação combinada da AMF com a dispersão de velocidade de grupo positiva do meio faz com que a frequência, na maior parte do pulso, seja uma função linear do tempo; manifesta-se como um pulso alargado temporal e espectralmente que pode ser comprimido no tempo pela passagem em linhas de atraso com dispersão oposta. Descrevemos o andamento de nossas pesquisas sobre este efeito em fibras ópticas monomodo, usando um laser de Nd:Yag com mode-locking contínuo ( $\lambda = 1.06\mu m$ , largura espectral  $\sim 0.3 \text{ Å}$ , pulsos com duração  $\sim 100 \text{ ps}$ , potências de pico 100 - 200 W) e uma linha de atraso formada por um par de grades de difração. No momento, estudamos o alargamento espectral  $\Delta\lambda$  em fibras monomodo de Telebrás como função da potência do laser. Em uma fibra de 1800 m, observamos  $\Delta\lambda \sim 17\text{Å}$  (em relação à largura espectral do laser), para uma potência média acoplada à fibra de 600 mW. Nota-se que  $\Delta\lambda$  é uma função crítica tanto da potência acoplada à fibra como do alinhamento. Trabalhos publicados na área reportam resultados semelhantes aos nossos com fibras curtas ( $\sim 300\text{m}$ ) e lasers de potências mais altas.

Agradecemos à FAPESP e à Telebrás pelo suporte financeiro.

**DTI/PAINEL****TEMPO DE CRESCIMENTO DO PULSO EM LASERS DE CORANTE SINTONIZÁVEIS**

J.H.Martin Rios, A.E.Kiel, H.L.Fragnito. (Instituto de Física, UNICAMP)

Estudamos experimentalmente a dependência do tempo de crescimento de um pulso,  $T$ , com o comprimento de onda  $\lambda$  num laser de corante sintonizável (com grade em ângulo de incidência rasant), bombeado transversalmente por um laser de nitrogênio (pulsos de 8 ns de fwhm, 400 kW de potência de pico, 5Hz de repetição). As medidas foram realizadas com um osciloscópio rápido e fotodiodo de avalanche (tempo de subida do conjunto  $< 1.2 \text{ ns}$ ); o comprimento de onda do laser foi monitorado num espectrômetro com analisador óptico de multicanais acoplado (resolução do conjunto  $< 0.04 \text{ nm}$ ).

Caracterizamos a dependência  $T(\lambda)$  em duas famílias de corantes, as Rodaminas e as Coumarinas (solvente: etanol; a concentrações entre 0.3 e 3 mMolar). Observamos que  $T(\lambda)$  exibe um mínimo perto do máximo de fluorescência no caso das Coumarinas e um tanto deslocado para o azul no caso das Rodaminas. A máxima variação,  $|dT/d\lambda|$ , é da ordem de 0.2 ns/nm em ambos os casos.

Estamos no momento elaborando um modelo teórico para o fenômeno a partir das equações de taxas para as densidades de populações e de fôtons na cavidade. Para isto já temos medido todos os parâmetros pertinentes, como espectros de fluorescência e absorção, perdas da cavidade em função de  $\lambda$ , etc. Trabalhamos agora num programa para simular numericamente a evolução do pulso laser, estas simulações irão testar a validade do modelo. (CNPq - FINEP)

**DTI/PAINEL****MEDIDAS DE TEMPOS DE RELAXAÇÃO TRANSVERSAL ULTRA-CURTOS EM SÓLIDOS. Sérgio C.**

Zilio (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Estamos implantando a técnica de eco de fôtons com luz incidente para medidas de tempos de relaxação transversal ultra-curtos em sólidos<sup>(1)</sup>. Esta técnica permite a medida de tempos de relaxação inferiores a 1 ps, usando pulsos de duração de 10 ns gerados por laser de corante com largura de linha de vários angstrons e bombeado por laser de Nd:YAG. São apresentados alguns resultados preliminares da relaxação do Nd<sup>3+</sup> em vidro e em cristal de YLF. (FAPESP, CNPq).

- (1) S. Asaka et al - Phys. Rev. A **29**, 228 (1984).
- (2) H. Nakatsuka et al - Opt. Commun. **52**, 150 (1984).
- (3) M. Fujiwara, R. Kuroda & H. Nakatsuka - J. Opt. Soc. Am. B **2**, 1634 (1985).

**OTI/PAINEL**

## INTERFEROMETRIA EM FIBRAS ÓTICAS UNIMODAIS

Jean Pierre von der Waid

Dept. de Física - PUC/RJ

Os retardos de grupo em fibras óticas unimodais podem ser medidos interferometricamente com uma precisão de ~ 2 fs entre 1000 nm e 1700 nm. Esta medida permite determinar a dispersão cromática de fibras unimodais, e em particular a dispersão de polarização em fibras birefringentes. Birefringências da ordem de 1 ps/m podem ser diretamente medidas sem o emprego de elementos polarizadores. A técnica pode ser estendida a fibra de refringência até 0.02 ps/m através da análise dos padrões de interferência em função do comprimento de onda. Esta técnica permite também determinar o retardos de fase entre os dois modos de polarização, com aplicações a sensores e sistemas de transmissão coerente.

**OTI/PAINEL**

## ALTERAÇÃO LOCALIZADA DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO EM MATERIAIS ISOLANTES: APLICAÇÃO NA PRODUÇÃO DE PERFIS E GUIAS ÓTICOS

Reul Almeida Nunes, Sidnei Paciornik, Luis Carlos Guedes Valente,

Hipólito José Kalinowski, Luiz Carlos Scavarda do Carmo

PUC/RJ, UFF

Os cristais ou filmes de materiais iônicos e iônicos-moleculares são muito sensíveis ao impacto de feixes de elétrons na faixa de 20 k e V a 30 k e V, formando, de forma localizada, grande densidade de defeitos superficiais do tipo "centros da cor". Esta propriedade, associada à focalização do feixe eletrônico de uma microscópia eletrônica (faixa de 1 a 100 micra) e aos recursos desenvolvidos de controlo de porta amostra permitiram desenvolver um sistema de geração de perfis por litografia eletrônica.

A alta densidade da absorção ótica produzida em substratos de LiF (pico de absorção de centro F está em 250 nm) produz variação do índice de refração na região do infravermelho suficientes para condução ótica ( $\Delta n \approx 10^{-3}$ ) e espessura da faixa de 5 a 10 micra).

Em nosso laboratório, guias ópticos com 20  $\mu$  de largura foram produzidos e métodos de lançamento de luz estão sendo analisados. O estudo da distribuição modal pretende-se analisar o perfil de índice de refração das linhas produzidas ao longo da profundidade da faixa.

**OTI/PAINEL**

## DESENVOLVIMENTO DE POTENCIÔMETROS ÓPTICOS PARA OPERAÇÃO EM REDES DE FIBRAS MONOMODO. Sergio Calascibetta e José Tadeu de Jesus, CPqD/Telebrás, C.P. 1579, Campinas - 13083 - SP.

O rápido desenvolvimento da aplicação de fibras monomodo em comunicações tem produzido grande demanda de acopladores e dispositivos correlatos tais como chaves ópticas seletivas e multiplexadoras. Apresentamos neste trabalho um mecanismo simples a partir do qual foi desenvolvida uma chave óptica seletiva ou potenciômetro óptico passível de operação a níveis sub-dB de perda. Esta dispositivo não possui componentes ópticos discretos sendo constituído apenas pelas fibras e sua estrutura de suporte mecânico. O chaveamento da potência luminosa é induzido mecanicamente através de deformações elásticas axiais da estrutura de acoplamento fabricada, na qual ocorre o fenômeno de batimento óptico. Observamos que 7 gf de carga aplicada axialmente à estrutura de acoplamento óptico produz 55% de variação nas potências ópticas de saída. Estes e outros resultados são interpretados assumindo-se deformações elásticas na estrutura de batimento óptico produzida pela fusão das fibras em um perfil bicônico. A perda total de potência óptica medida no dispositivo é de aproximadamente 0.1 dB e qual não é sensível à carga mecânica necessária à operação. Dada a simplicidade coestruita deste dispositivo, suas características de baixa perda e alta estabilidade mecânica, o mesmo torna-se atrativo para operações em redes de fibras monomodo ou em sistemas ópticos de instrumentação.

\* Também no Depto de Elétricidade da EESC-USP, 13560 - S.Carlos - SP.

**DTI/PAINEL** **MICROLENTE ELÍPTICA PARA ACOPLAMENTO ÓPTICO DE FIBRA MONOMODO COM LASER SEMICONDUTOR DE GUIAMENTO POR GANHO.** - José Tadeu de Jesus e Ildefonso F.Faria Jr. CPqD/Telebrás, C.P. 1579, Campinas, 13085, S.P.

A redução da perda no acoplamento laser semicondutor e fibra óptica é de grande interesse para comunicações ópticas. A dificuldade de se obter bom acoplamento reside na diferença entre os modos de emissão do laser (elíptico) e de guiamento da fibra (circular). Estudos sobre a eficiência do acoplamento laser semicondutor-fibra mostraram que fibras com face plana resultam em baixo acoplamento (~10%), além de introduzir ruídos no sinal emitido pelo laser decorrentes da reflexão de luz nesta face. Para melhorar esta eficiência e minimizar problemas de realimentação óptica, utiliza-se microlente na extremidade da fibra a ser acoplada ao laser. Esta técnica permite obter-se eficiência de até 30% para laser com guiamento por ganho. Neste trabalho procuramos melhorar o acoplamento laser-fibra utilizando uma estrutura com geometria elíptica e microlente. Esta geometria é obtida a partir de secção de acopladores bidirecionais de fibra óptica monomodo produzidos por fusão. Com esta configuração esperamos obter acoplamentos superiores a 40%. Resultados experimentais preliminares serão apresentados e discutidos.

**DTI/PAINEL** **UMA NOVA CONCEPÇÃO DE MODULADORES ELETRO-ÓPTICOS.** Sergio Cetaschi<sup>a</sup> e Cesar A.Evora. CPqD/Telebrás, C.P. 1579 - Campinas - 13085 - SP.

Sistemas de comunicação óptica de alta largura de banda e longas distâncias operam com lasers de pequena largura espectral ("Distributed Feed-Back Lasers"), sendo a informação transmitida via fibras monomodo. Estes lasers quando modulados a altas frequências (GHz) passam a ter larguras espetrais inconvenientes, comprometendo assim todo o sistema de comunicações. Moduladores eletro-ópticos externos ao laser têm sido utilizados para solucionar este problema, porém o estado-da-arte destes dispositivos padece de altas perdas de potência óptica (~7 dB por dispositivo) além de baixa estabilidade mecânica. Apresentamos neste trabalho uma nova concepção de moduladores eletro-ópticos, os quais são livres das limitações spontâneas acima. Nesta concepção, o modulador é formado por um acoplador 2x2 monomodo, no qual a fração da potência óptica transferida de uma fibra à outra é fortemente dependente do comprimento de onda transmitido e do índice de refração do meio externo às fibras na região de acoplamento. Estudos iniciais demonstram que este elemento apresenta boa estabilidade mecânica e opera a níveis de perda de potência eletromagnética inferiores a 1 dB. Suas propriedades ópticas são regidas pelo fenômeno de interferometria óptica, razão de extrema sensibilidade do dispositivo de acoplamento a pequenas variações nas constantes de propagação do meio. Sendo este acoplador convenientemente montado em um substrato eletro-óptico, ou seja, cujo índice de refração seja passível de modulação, as potências ópticas serão complementarmente moduladas nas duas fibras de saída do dispositivo. Serão apresentados dados preliminares bem como discutido o suposto princípio de operação de tal elemento de modulação.

\* Também no Depto de Eletricidade - EESC/USP - 13560 - S.Carlos - SP

**DTI/PRINEL** **TRAÇADO DE RAIOS EM SISTEMAS ÓPTICOS.** Jorge Hönel (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Os métodos usuais para a otimização de sistemas ópticos consiste em efectuar o cálculo através de uma expansão da Lei de Snell, em que os coeficientes das aberrações ópticas relacionam-se com o grau da expansão. No entanto a Lei de Snell admite duas representações vetoriais, com umas das envolvendo os co-senos diretores, com a base considerada no ponto de interceptação do raio na interface. O conjunto de equações que determinam a evolução do raio é bastante simples no traçado de raios meridianos, onde se pode estabelecer um conjunto comum de equações para curvaturas positivas e negativas de interfaces esféricas, e nas interfaces planas o resultado é imediato. Desse modo obtém-se dados sobre as aberrações cromáticas, foco paraxial, foco do círculo de confusão mínima, estabelecendo assim os parâmetros do sistema óptico em consideração.

OII/PAINEL

CASAMENTO DE FASE: UMA NOVA TÉCNICA PARA FABRICAÇÃO DE COMPONENTES HOLOGRÁFICOS

Lucila H. Cascato, Geraldo F. Mendes, Jaime Freijlich

Universidade Estadual de Campinas

É possível gravar sucessivamente dois hologramas mantendo entre eles uma relação de fase pré-determinada (em fase, contra-fase,  $180^\circ$ ). Isso poderá nos permitir gravar uma rede de difração passo-a-passo pela superposição espacial de rades normais.

O controle de fase pode visibilizar uma técnica muito discutida, mas pouco executada como a Síntese de Fourier, para produzir uma rede assimétrica (biased) por superposição de harmônicos espaciais.

Apresentaremos resultados experimentais preliminares.

OII/PAINEL

APLICAÇÃO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES PARA EXCITAÇÃO E DETEÇÃO EM ESPECTROSCOPIA RAMAN A Rubens B de Castro e Paulo R B Pedreira IFGW UNICAMP

Construimos um espectrometro Raman sem partes móveis, onde a fonte de excitação é um laser semicondutor de GaAlAs tipo monomodo longitudinal emitiendo em  $8600 \text{ \AA}$  e o detetor é um mosaico monolítico de foto-sensores de Si, refrigerado termoelectricamente a  $-40^\circ\text{C}$ , e controlado por um microcomputador. Para minimizar reflexos (que induzem funcionamento multimodo do laser), a radiação é collimada e dirigida sobre a amostra usando um refletor esférico. Com uma potência incidente de 5mW, calculamos que a exposição efetiva por sensor é 1650 eletrons/seg/picos Raman  $-1000 \text{ cm}^{-1}$  do tolueno. O desempenho medido foi 3 vezes pior do que o calculado, sendo isso atribuível a ineficiências no sistema de coleta da luz espalhada e iluminação não uniforme da região ativa. O desempenho calculado pode ser melhorado por 3 ordens de grandeza com aperfeiçoamentos técnicos e fontes mais potentes.

OII/PAINEL

LEITURA EM AMPLITUDE DE UM REGISTRO ÓPTICO EM FASE

Paulo A.M. dos Santos\*, Lucila H. Cascato, Geraldo F. Mendes, Jaime Freijlich  
Universidade Federal Fluminense\* - Universidade Estadual de Campinas

Uma imagem gravada num filme fotográfico pode ser observada porque ela modula a amplitude da luz que a atravessa; chama-se de registro em amplitude. A mesma imagem gravada num filme transparente de fotorresina resulta numa modulação de reflexo no filme e que não pode ser observado pois ela não afeta a amplitude mas a fase da luz na leitura (registro em fase) à qual o olho não é sensível.

É possível ler em amplitude um registro de fase se este (informação) modula a amplitude de uma rede de fase de alta frequência (portadora) gravada na fotorresina. Esta método tem algumas características interessantes: fácil reprodução, alta sensibilidade, alta fidelidade e difícil de distorcer. Serão apresentados resultados experimentais.

**OTI/PAINEL** LASER DE ARGÔNIO IÔNICO DE BAIXA POTÊNCIA. Artemio Scalabrin (Instituto de Física, Depto. Eletrônica Quântica, UNICAMP).

O laser de Ar<sup>+</sup> tem grande importância na pesquisa científica e nas aplicações tecnológicas por emitir linhas intensas, em regime contínuo, no espectro visível (488nm e 514 nm). Lasers de Ar<sup>+</sup> de potência da ordem de 1W ou mais exigem sistema de refrigeração de água gelada para sua operação. Nos últimos anos foi desenvolvido nos EUA, Europa e Japão um laser de argônio pequeno, refrigerado a ar, que apesar de sua baixa potência ( 1-20mW ) tem encontrado grande número de aplicações. Nessa comunicação apresentamos as principais características desse tipo de laser, bem como relatamos sobre o projeto de desenvolvimento de um laser de Ar<sup>+</sup> de baixa potência que está sendo elaborado na UNICAMP.

**OTI/PAINEL** ROTAÇÃO DE FARADAY EM CRYSTALS ELETRO-ÓPTICOS: Egberto Munin, Antonio Balbin Villaverde (Inst. de Física - UNICAMP).

A fonte de voltagem geradora dos pulsos intensos de campo magnético foi totalmente automatizada, conseguindo-se uma precisão melhor que 1% na seleção da voltagem desejada ( o equivalente mente do campo magnético ). Foram feitos testes da fonte com desempenho satisfatório. A calibração do sistema foi realizada através do uso de uma amostra de vidro PR-5, cuja rotação de Faraday é conhecida. O sistema, já caracterizado e calibrado, foi usado para medir a Rotação de Faraday de uma família de cristais eletro-ópticos deuterados e não deuterados: ADP, KDP, KDP\*, CDA e outros, correspondentes a diferentes cations e anions. A medição foi realizada cobrindo-se o espectro visível de 347 até 694,3 nm, mediante o uso de uma série de lasers. Um estudo foi feito tentando relacionar o valor da constante de Verdet dos diferentes cristais com as propriedades dos cations e anions que formam esses cristais.

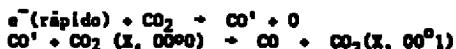
**OTI/PAINEL** LASER DE Nd:YLF CW COM 1 WATT\*. Wagner de Rossi, Gessé Eduardo Calvo Nogueira, Nilson Dias Vieira Junior e Spero Penha Horato. (Instituto de Pesquisas Energeticas e Nucleares IPEN/CHEN/SP).

Foi construído e testado mais um laser de Nd:YLF, o quinto de uma família de lasers de Nd:YLF que vimos desenvolvendo no IPEN. A cavidade bombeadora é do tipo elipse dupla com refletores de ouro e com duas lâmpadas de tungstênio-hologênio perfazendo 2000 watts de potência de entrada. Foram utilizados bastões de Nd:YLF usinados e polidos em nossos laboratórios e medidas comparativas com bastões de Nd:YAG foram realizados e serão apresentados. FINEP.

\* Projeto FINEP

**OII/PAINEI** RELAÇÕES ENTRE POTÊNCIA DE EXCITAÇÃO E COMPOSIÇÃO DA MISTURA GASOSA EM LASERS DE CO<sub>2</sub>. Dc. J. A. Martins de Mello, R. N. da Bragança e C. A. Massone, Laboratório de Espectroscopia e Laser, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, CP 296, Niterói, 24210 RJ.

O estudo das relações entre componentes da mistura gassosa (CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-He) para lasers de CO<sub>2</sub> apresenta um interesse crítico por sua relação com a eficiência de funcionamento e potência máxima de emissão do laser. Foram analisadas as misturas (CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-He) 1-X-Y com X=0, 1, 2, 3 e 4 e Y=5, 8, 10 e 12; para tubos de descarga de 1 metro de comprimento e diâmetros de 8 e 10 mm. Se achou um comportamento geométrico novo no plano "potência de excitação vs. pressão parcial de CO<sub>2</sub> na mistura gasosa". Este comportamento planteia uma série de dúvidas em relação ao significado das elipses obtidas, sua disposição concêntrica, o significado dos focos, etc. Da análise das misturas 1-0-Y foi possível inferir a taxa de dissociação do CO<sub>2</sub>, dando um indicativo do processo de transferência resonante de energia.



Trabalho parcialmente financiado por FINEP e CNPq

**OII/PAINEI** NOVOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS NA GERAÇÃO DE PULSOS LASER MULTIPLOS NO CO<sub>2</sub> EXCITADO POR CONFIGURAÇÃO DE CATODO OCO. N. Brito Fernandes Filho, R. da Maceio Mendes, C. B. Pappaleo e C. A. Massone, Laboratório de Espectroscopia e Laser, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, CP 296, Niterói, 24210 RJ.

Foi apresentado recentemente (1-2) um laser de CO<sub>2</sub> excitado por configuração de catodo oco que gera um conjunto de pulsos laser múltiplos, para um único pulso de excitação. Este sistema se baseava no modelo de C. S. Willett (3) com 5 anodos. Desta maneira se obteve um comportamento que permitiu determinar a proporção CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> que optimizava o processo de transferência resonante de energia.

O trabalho foi agora realizado com um sistema de 10 eletrodos, como meio de optimizar a descarga de "glow" negativo ao diminuir a distância entre anodos para um mesmo comprimento de catodo. Os resultados confirmam totalmente o obtido anteriormente e ampliam a complexidade do problema sob análise ao apresentar uma segunda série de picos nos intervalos temporais para proporções variáveis de N<sub>2</sub> da mistura. Isto não tem, no momento, explicação teórica.

Trabalho parcialmente financiado por FINEP e CNPq

- 1.- R. de Maceio Mendes, J. L. da Souza Oliva e C. A. Massone; 4th International Symposium on Quantum Optics, New Zealand (1986)
- 2.- R. de Maceio Mendes, J. L. da Souza Oliva e C. A. Massone; Revista Brasileira de Vácuo 5, 168 (1985)
- 3.- C. S. Willett; IEEE Journal of Quantum Electronics (Correspondence) 568 (1970)

**OII/PAINEI** ESTUDO DO MECANISMO DE CHAVEAMENTO PASSIVO DE UM LASER PULSADO DE Nd:YLP. Luiz Santiago de Assis<sup>a</sup>, Eliseu Augusto Vicente<sup>a\*</sup>, Wagner da Possi<sup>b</sup>, Nilson Dias Vieira Junior<sup>c</sup> e Spero Penha Morato. (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN/SP).

Será descrita a operação do laser de Nd:YLP com chaveamento passivo utilizando um absorvedor saturável de centros de F<sub>1</sub> em LiF. Esses centros são obtidos com cristais de LiF ultrapuros crescidos pela técnica de refino por zona sob atmosfera de HF. Esses cristais são então irradiados com feixe de elétrons, sendo que um dos produtos de irradiação são os centros F<sub>1</sub>. Esses centros possuem uma banda de absorção larga, centrada em 960 nm, uma banda de emissão centrada em 1.12 μm e um tempo de decaimento de ~ 100 ns à temperatura ambiente. Já obtivemos pulsos de duração de 80 ns no regime Q-switched e presentemente estamos estudando a influência dos parâmetros de saturação na operação do laser nesse regime e a possível utilização no regime de operação "mode-locked".

\* Com apoio da FINEP.

<sup>a</sup> Bolsista de Doutoramento CAPES-PICD, UFSC.

<sup>c</sup> Bolsista de Mestrado CAPES-PICD, UF Itajubá.

**OTI/PAINEL** CARACTERÍSTICAS DE CIRCUITOS DE EXCITAÇÃO PARA LASERS DE H<sub>2</sub> DE ALTA EFICIÊNCIA.

Z. Moreira Gomes, C. E. Fellows, A. Dias Tavares Jr. e C. A. Massone, Laboratório de Espectroscopia e Laser, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, CP 296, Niterói, 24210 RJ.

Pôr publicado recentemente (1) um trabalho donde se obteve uma eficiência de 3% no funcionamento de um laser do tipo TE de H<sub>2</sub>, de baixa pressão. Analizando a posição do máximo de potência laser de emissão em gráficos do tipo "potência laser de emissão vs. energia de excitação" se determinaram curvas de variação destes máximos em função da pressão de H<sub>2</sub> no tubo de descarga e a energia de excitação. Estes gráficos mostram famílias de retas cujas pendentes permitem: a) estudar a influência das frequências de ressonância de circuitos excitadores e b) analisar a influência dos valores de impedância do circuito no comportamento do laser. Desta modo, tem sido possível explicar os resultados obtidos em (1) como também os resultados do trabalho de Nagata e Kimura (2) em relação aos valores de impedância parassita do circuito.

Trabalho parcialmente financiado por FINEP e CNPq

- 1.- B. Oliveira dos Santos, C. E. Fellows, J. B. de Oliveira e Souza e C. A. Massone (A 32 efficiency H<sub>2</sub> laser) Applied Physics B (A ser publicado em 1987)  
2.- I. Nagata e Y. Kimura; J. Phys. B 6, 1193 (1973)

**OTI/PAINEL**

## DETERMINAÇÃO DE CONSTANTES ÓPTICAS EM FILMES FINOS, Sérgio Brito Mendes, FUNPEC

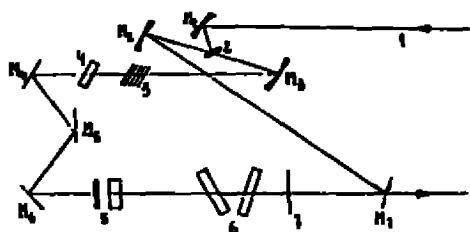
A partir de trabalhos desenvolvidos por Manifacier e Suareposi sobre o método de curvas envolventes na determinação de constantes ópticas, desenvolvemos algoritmo computacional e aplicamos o método na caracterização de filmes finos dielétricos de interesse na fabricação de filtros ópticos interfereenciais.

Atéreas de medidas espectrofotométricas, refletância e transmittância de monocamada depositada em substrato de índice de refração conhecido, o método possibilita a determinação das constantes ópticas do material depositado: índice de refração n, constante de absorção k e espessura do filme d.

No presente trabalho, exponemos os resultados encontrados na caracterização de TiO<sub>2</sub> e SiO.

**OTI/PAINEL** CONSTRUÇÃO DE UM RING DYE LASER. Marcos L. Manzochi, Luiz A. O. Nunes e Jairbas C. Castro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Estamos construindo um Ring Dye Laser contínuo com componentes nacionais, à partir de um desenho fornecido pelo Prof. Claude Guy de Universidade de Paris IV, com o qual obtém-se resoluções melhores que MHz (ver ilustração abaixo). Os elementos intracavidade e os componentes tais como etalons, lâminas de compensação, filtros e espelhos foram desenvolvidos na Oficina de Ótica do IFQSC. No momento estamos trabalhando na eletrônica de estabilização e na monitoração dos elementos de sintonização por um microcomputador. Além da aplicação deste laser no estudo de defeitos em sólidos, estamos utilizando-o em um experimento de espectroscopia de onda evanescente em uma célu- ta de vapor de sódio. Destas aplicações poderemos obter indicações sobre a utilização de defeitos como memória ótica e sobre a interação de átomos em superfícies.



1. PONTE DE BOMBEIO (Ar)
2. JATO DE CORANTE
3. LYOT FILTRO
4. ROTADOR DE PARABOL
5. FABRY-PEROT INTRAVIDADE
6. PLACAS PARALELAS
7. ETALON FINO
- R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub> : ESPELHOS ESFÉRICOS
- R<sub>4</sub> : ESPELHO DE SAÍDA

**OTI/PAINEL** CÁLCULO E CONSTRUÇÃO DE FILTRO BIRREFRINGENTE DE PLACAS INCLINADAS PARA LASER DE CORANTE. Euclides Moreira Jr., Edvaldo Cardoso e Sérgio C. Zilio (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Estamos construindo um filtro birrefringente de placas inclinadas para uso intracavidade de lasers de corante C.W. "single mode". A performance do filtro foi calculada através de computador para servir de subsídio à sua construção. O cálculo utiliza matrizes de Jones e o conceito de autopolização dentro da cavidade. Erros aleatórios de espessura e orientação relativa entre as três placas de quartzo que compõem o filtro foram introduzidos no cálculo, de maneira a avaliar como estes erros afetam a eficiência da filtragem. As placas que compõem o filtro foram orientadas através de R-X e serão polidas numa polítriz da Logitech com paralelismo melhor que 5°. Após a montagem final, o filtro será testado com espectrofotômetro Cary 17 e na cavidade do laser de corante que estamos construindo. (FAPESP).

- (1) A.L. Bloom, J. Opt. Soc. Am. 64, 447 (1974).  
(2) G. Holton & O. Teschke, IEEE J. Q. Elect. QE-10, 577 (1974).

**OTI/PAINEL** TRANSIÇÕES DE FASE EM CRISTAIS DE  $\text{NH}_4\text{LiSO}_4$  - A.R.M.Martins, J.Mendes Filho, F.E.A.Melo, J.E.Moreira e F.A.Germano - Depto de Física da UFCe.

Cristais de sulfato de Lítio e Amônia ( $\text{NH}_4\text{LiSO}_4$ ) apresentam uma transição de fase a 10°C e outra a 186°C. Entre estas transições o material é ferro-elétrico impróprio.

Na temperatura ambiente este material pertence ao grupo espacial  $\text{Pna}2_1$  ( $\text{C}_{2v}^0$ ). Segundo Poulet e Mathieu<sup>(1)</sup>, após a transição de 10°C o cristal passaria a um grupo com simetria pontual  $\text{C}_2$ . No entanto, outros autores<sup>(2)</sup> indicaram a possibilidade de que o grupo espacial na fase de baixa temperatura seria da classe  $\text{C}_{2h}$ .

Os resultados de espalhamento Raman aqui apresentados resolvem essa ambiguidade de forma inequívoca. Evidências claras de dobramento polar (fonsos LO e TO) indicam que a estrutura não tem centro de inversão, eliminando a possibilidade de um grupo pontual  $\text{C}_{2h}$ .

- (1) - H.Poulet e J.P.Mathieu - Solid State Comm. 21, 421 (1977).  
(2) - O.T.Mitsui, T.Shiroishi, M.Takasugi, K.Ito e S.Suzuki - J.Phys.Soc.Japan 39, 845 (1975).

**OTI/PAINEL** TRANSIÇÕES DE FASE EM CRISTAIS DE  $\text{LiKSO}_4$  - A.J.S.Oliveira, J.E.Moreira, J.Mendes Filho, F.E.A.Melo e F.A.Germano - Departamento de Física da UFC.

Cristais de sulfato de lítio e potássio ( $\text{LiKSO}_4$ ) apresentam várias transições de fase em temperaturas abaixo de 300K. A natureza dessas transições tem sido objeto de muita controvérsia. Em particular, as transições que ocorrem a 200K e 160K, quando o cristal é resfriado, receberam várias interpretações discordantes. Foi sugerido que a transição a 200K seria de 1<sup>st</sup> orden, levando o cristal do grupo espacial  $\text{C}_2$  ao grupo  $\text{C}_{2v}$ . Isto parece contradizer algumas observações com difração de Raios-X. A transição a 160K parece ser do tipo ferro-elétrica e ferro-elástica, levando a uma estrutura ortorrômbica, possivelmente com grupo espacial  $\text{C}_{4h}$ .

Um estudo extensivo dessas transições foi efetuado utilizando-se técnicas de espalhamento Raman e medidas de constante dieletrica. Os resultados sugerem uma explicação para a transição de 200K que reconcilia as observações de espalhamento de luz e de raios-X. Nesse modelo, um re-arranjo rápido dos fonsos  $\text{SO}_4^{2-}$  em torno de um eixo paralelo ao eixo-c do cristal torna possível uma estrutura média com eixo  $\text{C}_2$  e uma simetria instantânea com eixo  $\text{C}_3$ .

A segunda transição (a 160K), que realmente leva a uma estrutura ortorrômbica, parece ser precedida por uma fase intermédia, através de uma transição do tipo ordem-desordem, ocorrendo em torno de 185K. Essa transição seria devida ao congelamento da rotação impedita dos fons sulfato, com um pequeno re-arranjo dos fons de potássio.

\* Departamento de Física da Universidade Federal do Maranhão  
Campus do Bacanga - 65.000 - Maranhão

OTI/PAINEL

EQUAÇÕES DE TAXA E BIESTABILIDADE ÓTICA EM LASER DE CO<sub>2</sub> SEQUENCIAL. Petrus A. Alcantara Jr., J.W. Tabosa e J. R. Rios Leite, Departamento de Física, UFPE.

Apresentaremos as propriedades da biestabilidade de um laser de CO<sub>2</sub> operando entre as linhas regulares e sequenciais [1] e sendo chaveado por corrente na descarga, pressão numa célula de CO<sub>2</sub> puro dentro da cavidade e dimensão da cavidade por variação de um suporte de espelho com piezoelettrico. Discutiremos as equações de taxas de relaxação de população que explicam o comportamento quasi-estático e as oscilações temporais possíveis no sistema [2].

[1] J.W. Tabosa e J.R. Rios Leite, Opt. Lett. 11, 566, 1986.

[2] H.M. Gibbs, "Optical Bistability : Controlling light with light", Academic Press, N.Y. 1985.

OTI/PAINEL

ARRAY DE LASERS DE PERFIL DE GANHO INVERTIDO

Thebano Emílio de Almeida Santos<sup>1</sup>, Sandro Marcelo Rossit<sup>2</sup>, Frederico Dias Nunes<sup>2</sup>, Teresinha de Jesus Serra Mattos<sup>2,3</sup>

\* Elebra Microeletrônica S/A

<sup>2,3</sup> Estagiário na Elebra Microeletrônica S/A (IFGW - UNICAMP)

<sup>2,3</sup> LPO, UNICAMP

Utilizando cálculos computacionais, simulamos a influência da temperatura sobre o ganho, perfil de portadores e índice de refração de um Laser Array obtido a partir do Laser de ganho Invertido (F.Prince e N.B.Patel), Proceeding IOOC-8833, 29D3-10). A partir destas curvas, verificamos a possibilidade de projetar lasers de alta-potência para aplicações em diversas áreas.

OTI/PAINEL

OBSERVAÇÃO DE CAOS DETERMINÍSTICOS EM DESCARGAS ELÉTRICAS EM GASES. Thomas Braun<sup>1</sup>, Jorge A. Lisboa<sup>1</sup>, Ricardo E. Francke<sup>1</sup> e Jason A.C. Gallo<sup>1</sup> (Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul<sup>1</sup> e Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina<sup>2</sup>)

Nós mostramos que descargas elétricas em gases sob excitação D.C. podem apresentar oscilações na corrente que assumem um comportamento caótico determinístico. É caracterizada uma rota para o caos via dobramento de período para descargas seladas num tubo de Pötschke contendo hélio. Esse sistema também apresenta triplicamento e quintuplicamento do período que seguem após uma bifurcação de período 2 para o caos. Além disso, observamos sequências de dobramento de período para descargas abertas ("flowing systems").

**OTI/PAINEL** DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS AMORFOS E CRYSTALINOS PELO MÉTODO SOL-GEL. Nelcy Della Santina Mohallem e Michel André Aegerter. Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

Utilizamos o processo Sol-Gel para deposição de camadas finas sobre vidros com espessura controlada, pela técnica "dip-coating" a partir de soluções organometálicas. Preparamos camadas de  $TiO_2$ ,  $SiO_2$ ,  $TiO_2-CeO_2$  e camadas coloridas de  $SiO_2-R_2O_3$  onde R = Co, Cr, Mn, Fe e Cu. Descreveremos o processo de fabricação, assim como algumas aplicações tecnológicas e discutiremos os resultados obtidos. Pesquisa subvencionada pela FAPESP, FINEP, CNPq e CNEA.

**OTI/PAINEL** CRIAÇÃO DE CENTROS DE COR DO TIPO  $F_B(II)$  EM MATRIZ DE  $KCl:Na^+$ . Germano Wochl Jr.\* e Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química da São Carlos, USP).

O centro  $F_B(II)$  numa matriz de KCl consiste num centro F acoplado a duas impurezas de  $Na^+$ , vizinhas mais próximas. Cristais de  $KCl:Na^+$  com centros  $F_B(II)$  são utilizados como meio ativo de laser na região do infravermelho próximo. Com este cristal é possível obter emissão laser sintonizável continuamente num intervalo de 2,25 a 2,65  $\mu\text{m}$ . Como fonte de excitação pode ser utilizado um laser de Ar\* em 514 nm. Embora o cristal com este tipo de centro de cor seja bastante estudado, as técnicas para produção destes centros não são amplamente divulgadas. O processo conhecido para produzir estes centros é pela irradiação da banda F em torno de 514 nm (luz verde). No entanto, juntamente com os centros  $F_B(II)$  são formados outros tipos de centro de cor, denominados  $F_B(1)$  e  $F_A(1)$ , que competem na absorção do feixe de excitação dos centros  $F_B(II)$ , impedindo a ação laser. Pela análise do espectro de absorção, verificamos que uma posterior irradiação do cristal em 590 nm, des-trói os centros  $F_A(1)$  e incrementa os centros  $F_B(II)$  e  $F_B(1)$ . Sabe-se que a irradiação dos centros  $F_A(1)$  (em 590 nm) provoca uma reorientação desses centros. Então chegamos à conclusão que a teoria que conduz a um processo de migração do centro  $F_A(1)$ . Uma vez que este processo de migração explica a sua destruição para formação de outros tipos de centro de cor. Não conseguimos ainda observar a ação laser no  $KCl:Na^+$  com centros  $F_B(II)$ , por falta de uma fonte de excitação mais potente (um laser de Ar\* com potência maior que 1W), mas com o domínio da técnica de preparação deste meio ativo, conseguimos um grande avanço para estender o intervalo de operação do Laser de Centro de Cor que desenvolvemos e já está em funcionamento. (FAPESP, CNPq, FINEP).

\* Endereço atual: CTA-IEAv - Divisão de Laser

**OTI/PAINEL** TRANSIÇÃO DE FASE TETRAГОNAL-MONOCLINICA EM KDP-K.C.Serra\*, F.E.A. Heilo, J.Mendes Filho, J.E.Moreira e P.A.Germano - Deptº de Física da UFC.

Cristais de  $KH_2PO_4$  (KDP) sofrem uma transição de uma fase tetragonal para uma fase monoclinica quando aquecidos da temperatura ambiente a uma temperatura acima de 453K.

Este trabalho apresenta uma evidência clara dessa transição de fase através de observações com o espalhamento Raman. A temperatura de transição é fortemente dependente da amostra e do tratamento térmico a que ela é submetida. A fase monoclinica é meta-estável e persiste durante tempo muito longo mesmo quando o material é trazido de volta à temperatura ambiente em condições controladas.

\* Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas.

**OTI/PAINEL** EMISSÃO VIBRACIONAL DO CN<sup>-</sup> INDUZIDO POR ABSORÇÃO DO CENTRO F EM CRISTAIS DE KCl IMPURIFICADO COM OCN<sup>-</sup>. Guillermo Guzman Martel e Máximo Siu Li (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

O acoplamento de centros F com impurezas diatômicas do CN<sup>-</sup> em KCl, facilita através da absorção do centro F em 540 nm a transferência de energia para o CN<sup>-</sup> permitindo a emissão vibracional deste último em 4,8μ. Realizamos um estudo da emissão em função da concentração de centros F na presença de impurezas de OCN<sup>-</sup> introduzidas involuntariamente durante o crescimento do cristal (KCl + 1% KCN), comparando estes resultados com amostras de mais alta pureza que não possuem OCN<sup>-</sup>. Os resultados obtidos indicam uma concentração de  $4 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> de centros F como a melhor concentração para observação da emissão vibracional. A presença detectada de  $10^{-4}$  mol de OCN<sup>-</sup> não inibe a fluorescência do CN<sup>-</sup> como era acreditado em outros trabalhos. (FAPESP, CNPq).

**OTI/PAINEL** ESTUDO DE MEDIDAS DE DISSIMETRIA ÓPTICA NA CERA DE CARNAUBA - A.M. de Paula e G.A. Barbosa - Departamento de Física - ICEx - UFMG

Tendo em vista resultados já obtidos por Correlação de fotons e outras técnicas que descrevem a Cera de Carnauba na fase líquida como contendo aglomerados moleculares grandes de forma cilíndrica imersos em um líquido isotrópico, tentamos através de técnica mais direta medidas do tamanho e forma destes aglomerados. A dissimetria da luz espalhada, razão da intensidade para dois ângulos de espalhamento simétricos em relação a 90°, fornece de forma direta essas informações. Montamos um sistema óptico-eletrônico para medir a função  $d(\theta) = I(\theta)/I(-\theta)$ .

Para testar o sistema foram feitas medidas para uma suspensão de esferas de poliestireno.

Separamos a Cera de Carnauba em frações por cromatografia líquida de coluna e estamos fazendo medidas para cada fração e combinações de frações.

(ver também seção de painéis).

**OTI/PAINEL** ESTUDO DO PROCESSO DE GELIFICAÇÃO DE SOL DE SÍLICA POR ESPALHAMENTO DINÂMICO DE LUZ. E.C. Ziemath, D.I. dos Santos, M.A. Augerter\*, J.E.G. Morgado\*\*. \* Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Ca. Postal 369, 13560 São Carlos, SP; \*\* Universidade Federal do Ceará, Ca. Postal 1262, 60000 Fortaleza, CE.

O espalhamento de luz, estudado em função do tempo e de ângulo de espalhamento, permite obter informações dinâmicas sobre os processos de crescimento de partículas. As medidas do coeficiente angular  $\Gamma = d \ln g(q,t)/dt|_{q=0}$  da função de auto-correlação do campo elétrico da luz espalhada pelas partículas em suspensão  $g(q,t) = \langle E(q,t), E(q,t') \rangle$  fornece a taxa média de relaxação de flutuação espectral  $q = 4\pi \lambda \sin \theta/2$ . Apresentaremos os resultados concernentes às microesferas monodispersas de sílica em suspensão (sol) preparadas a partir de soluções organometálicas altamente básicas de TMDS/álcool/água (método de Stöber). Pesquisa subvencionada pela FAPESP, CNPq e FINEP.

**OTI/PAINEL** DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DE CAMPO CRISTALINO DO  $\text{Er}^{3+}$  NO  $\text{AlCl}_3$ <sup>\*</sup>  
G. Caotto, M. A. Pires, J. A. Sanjurjo, G. E. Barberis e C. Rettori (Instituto de  
Física, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP)

Experimentos de foto luminescência de alta resolução, à temperatura de 15 K, permitem a identificação das transições entre os estados  $^4S_{3/2}$  -  $^4L_{15/2}$  correspondentes às impurezas de  $\text{Er}^{3+}$  no campo cristalino quasi cúbico do  $\text{AlCl}_3$ . As medidas foram realizadas utilizando a linha 4880 Å de um laser de Argônio, um espectrômetro monocrônador duplo e a técnica de contagem de fótons para a detecção da luz emitida. Os parâmetros de sexta, quarta e segunda ordem de campo cristalino foram determinados a partir dos espectros de luminescência. Experimentos de RPE a 4,2 K confirmam que o estado fundamental do  $\text{Er}^{3+}$  corresponde a um duploto Kramer quasi isotrópico com  $g = 8,90 \pm 0,05$ . As amostras foram preparadas a partir de limalhas da liga  $\text{Al}_{1-x}\text{Er}_x$  ( $x = 0,1$ ) a qual se faz resgir dentro de uma ampola de quartzo num reator de  $\text{Cl}_2$  com pressão e temperatura controladas.

\*Parcialmente financiado pela FAPESP, CNPq e CAPES.

**OTI/PAINEL** EFEITOS DE SATURAÇÃO EM TRANSIÇÕES ATÔMICAS ESTIMULADAS POR LASER C.W. SINTONI  
ZÁVEL. ARMANDO MIRAGE, IPEN/CNEM/SP.

Apresentamos um método para determinação da potência de saturação em transições atômicas estimuladas por laser. Descrevemos uma experiência onde foram feitas medidas de absorção óptica por átomos numa descarga de catodo nulo, usando um laser contínuo, sintonizável, de alta resolução. Os valores do produto da seção de choque de absorção pelo tempo de decaimento do nível excitado ( $\sigma_0 \cdot \tau$ ) e da temperatura dos átomos foram obtidos pela análise do perfil da linha de absorção.

**OTI/PAINEL** ESTUDO DO  $\text{Eu}^{+3}$  COMO IMPUREZA EM  $\text{GdAlO}_3$ . Sebastião J.N. da Pádua, Luis A.O. Nunes e Jardan C. Castro Neto (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Atualmente estamos estudando  $\text{Eu}^{+3}$  como impureza em  $\text{GdAlO}_3$ . O íon trivalente de Euroício substitui o Gadolinio neste cristal e está submetido a um campo cristalino de simetria  $C_n$ . Em trabalho anterior<sup>(1)</sup> foi mostrado, através de espectroscopia no infravermelho, que a simetria local  $C_n$  no  $\text{GdAlO}_3$  pode ser estudada como uma simetria cúbica ( $D_h$ ) submetida a uma leve distorção (uma perturbação de ordem superior) com simetria  $C_n$ . Medidas preliminares no espectro visível das absorções de  $\text{Eu}^{+3}$  em  $\text{GdAlO}_3$  mostraram as absorções do estado fundamental  $^7F_0$  para os estados  $^3D_0$ ,  $^3D_1$ ,  $^3D_2$  com a estrutura devido ao campo cristalino de  $\text{GdAlO}_3$ . Essas linhas de absorção são bastante eqüitativas (dentro da resolução do espectrofotômetro Cary 17) e algumas delas, são sensíveis à variação de temperatura. Neste trabalho pretendemos fazer um estudo detalhado do cristal nessa região espectral, através de técnicas de luminescência e Raman estimulado, para entender o fenômeno descrito. A técnica de Raman estimulado é escolhida por dar informações sobre os níveis próximos ao estado fundamental e por induzir uma coerência entre os estados a serem estudados, podendo portanto dar informações sobre os tempos de interação.

(1) Bagnato, V.S.; Nunes, L.A.O.; Zilio, S.C.; Scheel, H.J. e Castro, J.C. - "Infrared Electronic Transitions of  $\text{Eu}^{+3}$  in  $\text{GdAlO}_3$ ". Sol. State Commun. 49(1):27-30, 1984.

**OII/PAINEL** DETEÇÃO ÓTICA DA RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DO CENTRO F<sup>+</sup> EM KCl:SH. Dario Autônio Donatti e Michel André Aegerter. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

As propriedades magneto-ópticas medidas em absorção do centro de cor F<sup>+</sup> em KCl:SH foram estudadas entre 1.5 e 20 K sob campo magnético de 0 até 5 T. A deteção ótica da ressonância paramagnética (ODPR) foi estudada nas transições 1s0g → 2p0u e 1s0g → 2p2u e o tempo de relaxação spin-rede T<sub>1</sub> foi determinado em função da temperatura para as condições de ressonância. Estudos estão em andamento para determinar a variação de T<sub>1</sub> em função do campo magnético. Pesquisa subvenzionada pela FAPESP, CNPq e FINEP.

**OII/PAINEL** REFLETIVIDADE NA CONJUGAÇÃO DE FASE COM LASER DE CO<sub>2</sub>. J.W. Tabosa, Cláudio L. Cesar, M. Dutrey e J.R. Ribe Leite, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco.

Discutiremos a teoria e o andamento de experimentos de conjugação de Fase de feixes de Laser de CO<sub>2</sub> por mistura de onda degenerada livre do efeito Doppler [1]. Os gases usados são SF<sub>6</sub>, CH<sub>3</sub>OH e CO<sub>2</sub> quente. Examinaremos a dependência da refletividade do meio conjugador com a desintonização entre o Laser e as Transições retrovibracionais das moléculas [2].

[1] R. Fisher "Optical Phase Conjugation", Academic Press, N.Y. 1983.

[2] R.L. Abrams e R.C. Lind, Optics Lett. 2, 94, 1978; 3, 205, 1978.

**OII/PAINEL** MUDANÇAS DE FASE INDUZIDAS POR PRESSÃO EM LAS. R. CENTODUCATTE - DFO - UFES - V. LEMOS - Instituto de Física - UNICAMP - J. E. MOREIRA, J. MENDES FILHO E F. E. A. MELLO - DF - UFCe

NH<sub>4</sub>Li<sub>50</sub> (LAS) pertence a uma classe de materiais ferroelétricos nos quais ocorrem várias transições de fase estruturais com rotação ou reorientação dos radicais quando a temperatura é variada. Para este material duas transições de 1<sup>o</sup> ordem foram observadas de acordo com o esquema: Pnma 186,5°C → Pna<sub>2</sub><sub>1</sub> 10°C (P2<sub>1</sub>/a). O diagrama de fase P-T para este material é limitado no extremo superior de pressão a 7 kbar e a simetria da fase de alta pressão é uma questão em aberto.

Nós observamos transições de fase no LAS no intervalo de 0 a 80 kbar utilizando o espectro Raman como indicador de mudanças de simetria.

Um dos fonons de vibração da rede derivado do modo tipo v<sub>1</sub> da molécula livre mostra um comportamento muito peculiar com a pressão no intervalo de 21 a 36 kbar. Este comportamento é discutido em termos das modificações e estabilização das fases estruturais do LAS.

OTI/PAINEL

**MEDIDA DO ÍNDICE DE REFRAÇÃO DE FILMES DIELETÉTICOS**

João Carlos Cancio, Sidnei Paciornik, Raul Almeida Nunes, Luis Carlos Guedes Valente e Luis Carlos Scavarda de Carvalho - Depto de Física - PUC/RJ

Pretende-se medir o ângulo de refração e espessura de filmes de materiais isolantes depositados a vácuo em substratos isolantes a partir de técnicas de reflectometria. Luz polarizada é aplicada com ângulo de incidência conhecido e a intensidade da luz refletida é medida. O perfil da intensidade de reflexão é comparado com o obtido por um programa de computador convenientemente parametrizado com os valores que se pretenda medir.

OTI/PAINEL

**MEDIDAS DE PROPRIEDADES ÓPTICAS E ELÉTRICAS DE FILMES METÁLICOS**  
R.M. de Agosto, M.N. Baibich e Flávio Horowitz. (Instituto de Física da UFRGS, 90049 Porto Alegre, RS)

Este trabalho, em fase inicial de montagem, visa fazer medidas simultâneas da refletância óptica e resistência elétrica de filmes metálicos durante sua deposição em substrato a temperatura ambiente. O interesse principal é o de estudar a transição entre a fase inicialmente isolante (substrato) e a fase condutora. Durante esta transição é que serão observados os efeitos de aglutinação ou nucleação de "ilhas" condutoras que, com a continuação do沉积o crescer até chegar à percolação.

O monitoramento da refletância do filme em crescimento será feito com laser HeNe ( $\lambda=632,8$  nm) à incidência quase-normal. A caracterização óptica deverá ser complementada com medidas interferométricas e polarimétricas após a deposição do filme.

As medidas elétricas serão realizadas utilizando um sistema de medida da condutividade em corrente alternada de baixa frequência com detecção síncrona e tempo de resposta muito menor que 6 segundos previstos para a faixa de interesse.

OTI/PAINEL

**DETERMINAÇÃO IN VITRO DO FATOR DE PROTEÇÃO SOLAR DE PRODUTOS BRASILEIROS.**  
Carlos X. Cardoso, Lucas M. Alves, Michel A. Agresta. Instituto de Física e Química de São Carlos - Universidade de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560 São Carlos, SP.

Os produtos de proteção solar são caracterizados por um número inteiro 2, 4, 8 etc. Por definição, este número é a razão dos tempos mínimos de aparecimento de eritema da pele recoberta de um produto e pele sem proteção quando submetida a irradiação de luz ultravioleta tipo UVB. Estes números são determinados por medidas in vivo. Descreveremos as técnicas ópticas usadas na determinação do fator de proteção solar FPS in vitro e daremos os resultados obtidos para vários produtos de fabricação nacional e estrangeira. Pesquisa subvencionada pelo CNPq, FAPESP e Johnson & Johnson.

**RESONÂNCIA MAGNÉTICA**  
Coord.: - Mário Engelsberg (UFPE)

**RES/10:13/5A.F** EFEITO CERENKOV MAGNETICO NO  $\text{CdCr}_2\text{Se}_4$  OBSERVADO ATRAVÉS DA RHM DO  $^{113}\text{Cd}$  - J.C. Fernandes e J.B. de Oliveira e Souza do Instituto de Física da Univ. Fed. Fluminense e H. Pink da Siemens Aktiengesellschaft, RFA.

O Efeito Cerenkov Magnético consiste na excitação de magnons por pulsos de corrente elétrica em materiais cujos portadores de corrente tenham alta mobilidade. A magnetização, ao recuperar seu valor inicial após o pulso de corrente, faz variar continuamente o campo hiperfino do  $^{113}\text{Cd}$  o que equivale a uma varredura de campo no caso em que a frequência do espetrômetro é mantida fixa. Para o  $\text{CdCr}_2\text{Se}_4$ , ferromagnético, a RHM do  $^{113}\text{Cd}$  a 77 K tem aproximadamente 200 kHz de largura, está centrada em 101.12 MHz, e a faixa variada pelo campo hiperfino após o pulso de corrente chega a 1% de seu valor de equilíbrio.

Pretendemos medir a frequência de RHM em função do tempo decorrido após o pulso de corrente cuja largura é da ordem de 1  $\mu\text{s}$ . Este trabalho está em andamento.

**RES/10:35/5A.F** RELAXAÇÃO SPIN-NUCLEAR REDS EM VÍDROS. Edval J.P. Santos e Mario Engelsberg (Departamento de Física, UFPE).

Os mecanismos de relaxação spin-redo em vidros em baixas temperaturas tem sido objeto de considerável atenção. Em quase todos os casos os núcleos estudados ( $\text{B}^{11}$ ,  $\text{Na}^{23}$ ,  $\text{As}^{75}$  e outros) possuem spin nuclear  $1/2$  e o mecanismo de relaxação envolve o momento quadrupolar do núcleo e os gradientes de campo elétrico nas posições nucleares. Temos realizado medidas de tempo de relaxação spin-redo  $T_1$  em vidros do tipo  $(\text{CaP})_x(\text{SiO}_2)_{1-x}$  observando a ressonância do  $\text{P}^{31}$  ( $I=1/2$ ) em temperaturas  $1.8 \text{ K} \leq T \leq 100 \text{ K}$ . Os resultados são comparados com dados existentes em  $\text{B}_2\text{O}_3$  vitreo ( $\text{B}^{11}$ ) na mesma faixa de temperaturas. Tendo em vista que no caso do  $\text{P}^{31}$  podemos ignorar os efeitos quadrupolares as analogias na dependência com a temperatura de  $T_1$  em ambos os casos permitem extrair algumas conclusões em relação ao proposto mecanismo que envolve os modos de tunnelamento característicos dos vidros.

**RES/10:55/5A.F** EFEITOS DE FLUXO DE FLUIDOS EM RESSONÂNCIA MAGNÉTICA. V.B. Pereira Leite, T. J. Bonagamba, A. Tannus, H. Panepucci, C. J. Magon, M. A. Schmidt (Departamento de Física e Ciéncias dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Apesar da Ressonância Magnética ser exposta há muito tempo como uma técnica não invasiva e aparentemente simples para se medir fluxo de fluidos, a sua realização na prática não é um assunto fechado. Isto porque o fluxo afeta as medidas por Ressonância Magnética de diferentes formas, que dependem tanto da técnica empregada, como do tipo de fluxo analisado. Aqui expomos os principais efeitos que aparecem nos experimentos por Ressonância Magnética Nuclear, as simulações dos mesmos, bem como possíveis utilizações destes efeitos para a medição de fluxo. Resultados experimentais obtidos no espetrômetro desenvolvido no Laboratório de Ressonância Magnética do IFQSC/USP são também apresentados. (FAPESP, FINERP)

**RES/11:15/5A.F** GERAÇÃO DE IMAGENS POR RMN EM CAMPOS ULTRABAIXOS. George Carlos do Nascimento, Ricardo Emmanuel de Souza e Mario Engelsborg (Departamento de Física, UFPE).

A geração de imagens por RMN em campos magnéticos ultrabaixos é uma área que ainda permanece pouco explorada mas que promete um desenvolvimento futuro bastante otimista. Nossos resultados preliminares na implementação da técnica usando campos magnéticos de 200 Gauss serão apresentados. A instrumentação em desenvolvimento inclui, além do equipamento de radio freqüências, a construção de um eletromagneto. O estágio atual do trabalho será discutido como também suas possíveis implicações.

**RES/11:35/5A.F** BOBINA DE RF PARA GERAÇÃO DE IMAGENS POR RMN - RESSOADOR LC DISTRIBUÍDO DE MÉDIO PÓRTE PARA 85 MHz. H. A. Schmidt, A. Tannus, T. J. Bonagamba, V. B. Pereira Leite, R. Panepucci (Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo).

Bobinas de radiofrequência para geração de imagens devem produzir campo magnético homogêneo na região da amostra e fornecer uma boa relação sinal/ruído na recepção dos sinais de RMN. Em freqüências altas o comprimento da bobina se torna uma fração razoável do comprimento de onda, e o projeto de bobinas não pode ser feito unicamente com base em parâmetros concentrados. Este trabalho apresenta os resultados obtidos no Laboratório de Ressonância Magnética (IFQSC/USP), onde foram construídas bobinas para obtenção de imagens de prótons em um magnete de 2 Tesla (85 MHz). Estas bobinas consistem em um circuito ressonante LC, onde a indutância e a capacitância são distribuídas de forma que a estrutura construída possua geometria cilíndrica, e também produza campo magnético o mais homogêneo possível. A geometria cilíndrica foi adotada visando máximo aproveitamento do espaço útil no interior do magnete. (FAPESP, FINREP).

**RES/11:55/5A.F** A STUDY OF NUCLEAR SPIN-LATTICE RELAXATION  $T_1$  FOR  $^{54}\text{Mn}$  IN THE ANTIFERROMAGNETIC DIELECTRIC CRYSTAL  $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . H.A.B. de Araújo  
Departamento de Física-UFSC e H.J. Stone - Clarendon Laboratory-Oxford-UK.

A systematic study of the dependence of the nuclear spin-lattice relaxation of  $^{54}\text{Mn}$  present as a dilute nuclear impurity in  $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  has been made below 1 K, using the technique of low temperature nuclear orientation. Variation of  $T_1$  for the two antiferromagnetic sublattices is presented as a function of applied field and of temperature, in the region of the antiferromagnetic-spin flop transition.

The differing applied field dependence of  $T_1$  for the two magnetic sublattices whose electronic moments are respectively parallel and antiparallel (up and down) to the external field have been interpreted in terms of unequal transverse fluctuations of the electronic spin and spin wave damping. For the temperature dependence, it is found that  $1/T_1$  increases as  $T^\alpha$  with  $\alpha = 1.40(2)$  and  $\alpha = 1.10(1)$  for the down and up sublattices respectively. It is shown that a simple spin wave approach is inadequate to provide a quantitative description of the relaxation phenomena near the antiferromagnetic - spin flop transition.

RES/8:00/6A.F

**ESPECTROS DE RPE DE AMOSTRAS POLICRISTALINAS A PARTIR DE HAMILTONIANOS EFETIVOS DE SPIN COM INTERAÇÃO QUADRUPOLAR FORTE. R.R.Sobral, N.V.Vugman, UFRJ**

Hamiltonianos efetivos de spin, introduzido por Abragam e Price (contendo as interações hiperfinais magnéticas), é bastante eficaz na interpretação dos experimentos de espectros de RPE. Para obter soluções analíticas do referido hamiltoniano, usa-se a teoria de perturbação adequada (essa teoria consiste em aplicar rotações ao sistema de coordenadas dos tensores  $g$ ,  $A$  e  $P$ ), apenas para as direções principais do espectro. As funções resultantes envolvem a convolução da forma de linha do espectro de um monocristal e a intensidade de absorção (obtida a partir do referido hamiltoniano) em função do campo magnético aplicado e integrado sobre a superfície de uma esfera unitária.

De posse destas funções analíticas confeccionamos um programa de computador (fortran) para simular os espectros de pó.

RES/8:20/6A.F

**MEDIDAS POR R.P.E. DA INTERAÇÃO QUADRUPOLAR EM COMPLEXO DE OSMIO MONOVALENTE. S.Martins Junior e N.V.Vugman (Instituto de Física da UFRJ).**

A análise por R.P.E. (Ressonância Paramagnética Eletrônica) do complexo  $K_2Os(CN)_8$ , inserido em rede de KCl e irradiado a 77K (Vugman, N.V., Rossi, A.M., Damon, J., (1973) J.Chem.Phys.68, 3152) mostra a formação de espécies penta-coordenadas instáveis a temperatura ambiente, que apresentam Interação Quadrupolar Forte identificada através da assimetria e da superposição das linhas centrais do multipleté hiperfino (Vugman, N.V., Caride, A.O., Damon, J., (1973), J.Chem.Phys., 59, 4418).

O estudo de amostras similares irradiadas a temperatura ambiente mostra a formação de espécies hexa-coordenadas mono e di-cloradas, estáveis a temperatura ambiente. Na espécie mono-clorada também foi identificada a presença da Interação Quadrupolar Forte (S.Martins Junior - Tese de Mestrado - Instituto de Física-UFRJ-1985).

Experiências realizadas a 12K, possibilitaram a medida dos componentes do tensor quadrupolar na espécie di-clorada. Os valores encontrados dos componentes dos tensores  $g$ ,  $A$  e  $P$  desta espécie são :  $g_A = 2.6135$ ,  $g_E = 1.6714$ ,  $A_{1g} = 291G$ ,  $A_{2g} = 492G$ ,  $P = 45G$ ,  $P = 54G$  e  $P = 99G$ . A interpretação destes espectros de R.P.E. foi realizada utilizando-se fórmulas que descrevem o comportamento dos espectros de R.P.E. na presença de interações Quadrupolares Fortes (Vugman, N.V., Caride, A.O., Zanette, S.I., Molec. Phys. 35, 3, 715, 1978).

Cabe ressaltar que esta é a primeira vez que se consegue medir o valor dos componentes do tensor quadrupolar para um complexo de Osmio monovalente.

Está sendo realizado um estudo comparativo sistemático com bases na teoria de orbitais moleculares, entre as espécies penta-coordenadas e hexa-coordenadas mono e di-cloradas de Osmio (I) e Iridio (II). (FINEP, CNPq, CEPG-UFRJ).

RES/8:40/6A.F

**ESTUDO POR RPE DE NOVAS ESPECIES BROMADAS DE IRÓDIO DIVALENTE. C.G.A. Bastos e N.V.Vugman (Instituto de Física-UFRJ).**

A irradiação por Raios-X, a temperatura ambiente (T.A.) e a 77K, do íon diamagnético  $Ir^{III}(CN)_6^{4-}$ , inserido em uma rede de KBr, produz pelo menos duas espécies paramagnéticas diferentes estáveis à T.A., com configuração  $5d^7$  - 1/2 spin.

A primeira espécie detectada, o complexo pentacoordenado  $Ir^{IV}(CN)_5^{3-}$ , apresenta  $g_A = 2,271$  g, em torno de 1,965 e  $A_{1g}^{1g} = 22,3G$ . A segunda espécie encontrada, o complexo monobromado  $Ir^{IV}(CN)_4Br^{4-}$ , apresenta  $g_A = 2,169$ ,  $g_E = 1,965$ ,  $A_{1g}^{1g} = 15,2G$  e  $A_{1g}^{1g} = 53,1G$ . A componente paralela do tensor hiperfino do complexo pentacoordenado não foi medida devido a superposição com o complexo monobromado, podendo-se apenas estimar a componente paralela do tensor  $g$ .

Através do estudo da variação angular, observamos que ambas as espécies apresentam simetria axial. Foi medida também, a componente perpendicular do tensor superhiperfino de nitrogênio do clioneto axial, que vale  $A_{1g}^{1g} = 4,6 G$  para ambas as espécies.

Estamos investigando a interação quadrupolar forte (SQL) nos sítios de iridio e do bromo na espécie monobromadão que ambos apresentam momento de quadrupolo alto. Esta análise está sendo feita cuidadosamente pois a espécie monobromada encontra-se parcialmente recoberta pela espécie pentacoordenada. Podemos detectar porém, um efeito conjugado de SQL com o ligante e com o metal, caso único na literatura.

(FINEP, CNPq, CEPG-UFRJ).

RES/9:00/6A.F

ROTULAÇÃO DE FUNÇÕES BASE DAS IRREPS DOS GRUPOS DÚPLOS PONTUAIS  
CРИСТАЛОГРАФИЧЕСКИЕ АЛГЕБРЫ -  
A.O.Carido, S.I.Zonette e S.R.A.Nogueira

Neste trabalho mostramos como pode ser feita a rotulação das representações irreduzíveis de grupos duplos pontuais cristalográficos e das suas bases correspondentes, construindo um operador autoadjunto único, que rotula através de seus autovalores, com a vantagem de que estes autovalores podem ser escolhidos tal que sempre evidenciam a descendência em simetria numa sequência de subgrupos. O método pode ser extendido a sequências que incluem não apenas grupos finitos mas também grupos compactos, já que eles possuem irrepas unitárias do dimensão finita.

RES/9:20/6A.F

ESTUDO POR RPE DE  $\text{Fe}^{3+}$  EM  $(\text{NH}_4)_2 \text{InCl}_5 \text{H}_2\text{O}$

C.S.M.Partiti (PUC S.PAULO), A.Piccini e H.R.Rechenberg (IFUSP)

Medidas de RPE do sal  $(\text{NH}_4)_2 \text{FeCl}_5 \text{H}_2\text{O}$  diluído no sal isomórfico de In apresentam dependência angular estudada por Misra (1).

Especros podem ser explicados por dois sítios não equivalentes no plano ac com o eixo z fazendo  $40^\circ$  com o eixo a. Para os dois sítios o eixo z coincide com o eixo b.

Variando a temperatura desde o ambiente até o do nitrogênio líquido determinamos a variação dos parâmetros da hamiltoniana de spin.

(1) S.K. Misra and G.E.Sharp, J.Chem. Phys. 66, 4172 (1977).

RES/9:40/6A.F

LEVANTAMENTO DA SUB-ÁREA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA. Mario Engelsberg, Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50.000 Recife, PE.

Faremos um informe sobre o levantamento da Física Brasileira patrocinado pela SBF na Área de Física da Matéria Condensada Sub-Área de Ressonância Magnética. Resumiremos o relatório apresentado.

**RES/10:15/6A.F** ESTUDO POR RPE DA TRANSFORMAÇÃO DE FASE  $\alpha$ - $\beta$  EM CRISTOBALITA

$\text{AlPO}_4$ . Ronaldo S. de Bissi e Alvaro Simões (Seção de Engenharia e Ciência dos Materiais, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, RJ).

Na faixa de temperaturas em que ocorre a transformação de fase reversível  $\alpha$ - $\beta$ , o espectro de RPE de amostras da cristobalita  $\text{AlPO}_4$  apresenta uma linha cuja intensidade é proporcional à fração da fase  $\beta$  presente na amostra, determinada por difração de raios-X. Esta linha é atribuída a um defeito eletrônico que está presente apenas na fase  $\beta$  do material.

**RES/10:35/6A.F** ESTUDO POR R.P.E. DA FORMAÇÃO DE CENTROS DE  $V^{2+}$  EM  $\text{MgO}$

Antonio Alberto Ribeiro Fernandes (Seção de Eng. e Ciência dos Materiais-IME-RJ)

No presente trabalho, foi estudado, através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica (R.P.E.), a formação de centros de  $V^{2+}$  produzidas por irradiação em óxido de magnésio policristalino. Verificou-se que para amostra com maiores concentrações de vanádio menos centros de vanádio divalente são produzidos para um mesmo tempo de irradiação.

**RES/10:55/6A.F** RPE DA IMPUREZA  $\text{Mn}^{++}$  NO  $\text{AlCl}_3$  - GIC. G. Ceatto, S. Rolla, G. E.

Barberis e C. Rettori (Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas).

Experimentos de RPE em Banda-X em impurezas de  $\text{Mn}^{++}$  no  $\text{AlCl}_3$  - GICs, estágio 2, mostram que os íons  $\text{Mn}^{++}$  estão num sítio de simetria axial com seus eixos de simetria perpendulares às camadas de carbono. O espectro consiste de 31 linhas de ressonância do tipo Dyoniana, correspondendo às transições entre os níveis de estrutura fina e hiperfina do multipletado ( $S=5/2$  e  $I=3/2$ ) do  $\text{Mn}^{++}$  e à ressonância dos spins portadores de carga (CCSR) com valor isotrópico de  $g=2,0020$ . Os parâmetros da Hamiltoniana de Spin usual para simetria axial foram obtidos por ajuste de mínimos quadrados para a variação angular dessas 30 linhas, à temperatura ambiente, sendo  $g_L=1,9997$ ;  $g_T=1,9973$ ;  $D=154,9$  Gauss;  $a=-1,7 \times 10^{-4}$  Gauss,  $A_L=A_T$  Gauss e  $A_{JT}=88$  Gauss. Vale a pena ressaltar que, no que nos concerne, este foi a primeira observação do espectro de RPE de estrutura fina e hiperfina, completamente resolvida, do  $\text{Mn}^{++}$  numa matriz metálica.

RES/11:15/6A.F

**CORRELAÇÃO ENTRE OS DEFEITOS RESPONSÁVEIS PFLA THERMOLUMINESCÊNCIA (TL) E ESR DA CALCITA - Sonia Hatsue Tatumi(IFUSP), Masao Matsukata(IFUSP) e Shigueso Watanabe(IFUSP).**

Iniciamos um trabalho de datação por DTL(Dosimetria Termoluminescente) e ESR de uma peça de estalagmita, retirada da Caverna do Diabo-SP. Um dos problemas importantes na datação por estes métodos é a estabilidade à temperatura ambiente dos defeitos responsáveis pelos sinais de TL e ESR, que foram induzidos na amostra por radiação natural, portanto devemos identificar e conhecer as propriedades dos defeitos em questão.

A amostra forneceu dois picos TL distintos que aparecem na curva de emissão, com temperaturas de 261°C e 334°C e três sinais dominantes com  $g = 2,003$ ;  $g = 2,005$  e  $g = 2,013$  que aparecem no espectro de ESR medido à temperatura ambiente; notamos que os dois primeiros valores de  $g$  coincidem com os dos centros  $\text{CO}_2^+$  e  $\text{CO}_3^+$  respectivamente e o terceiro é um centro ainda não identificado.

Alguns pesquisadores (como T.Calderón, et al 1984 J.Phys.C:Solid State Phys. 17 2027-2038) relacionam o pico de TL de 250°C da calcita com o sinal de  $g = 2,003$ .

Através de tratamento térmico e irradiação com radiação gama estamos tentando encontrar tal correlação (Finep e CNPq).

RES/11:35/6A.F

**APLICAÇÕES DE RPE EM ESTUDOS DE INTERESSE A AGROPECUÁRIA.** Ladislau Martin Ne-  
to, Luiz Alberto Colnago (EMBRAPA-UAPOLIA-São Carlos/SP); Ana Rita A. Nogueira(EMBRAPA-UEPAE-Caixa  
Postal 339 - São Carlos/SP); Luiz A. Rizzon (EMBRAPA-CNPUV - Caixa Postal 130 - Bento Gonçalves-  
RS) e Oracílio R. Nascentes (Instituto de Física e Química de São Carlos - USP - Caixa Postal 369  
São Carlos/SP).

Estudos de aplicações práticas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) em agropecuária estão sendo desenvolvidos pela Unidade de Apoio a Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação Agropecuária (UAPDIA), da EMBRAPA (Empresas Brasileira de Pesquisas Agropecuária) em colaboração com o Instituto de Física e Química de São Carlos - USP - São Carlos. Em um dos projetos pretende-se caracterizar e determinar micronutrientes (ions de  $\text{Mn}^{2+}$ ;  $\text{Cu}^{2+}$ ;  $\text{Fe}^{3+}$  e outros) em solos e plantas. Utilizando um espetrômetro Varian E-109, Banda X (9GHz) soluções de alguns solos já foram analisadas e observou-se, principalmente, o ion  $\text{Mn}^{2+}$ . Tentativas de analisar o solo intacto estão sendo feitas, porém dificuldades surgem devido as elevadas concentrações de ions metálicos. As análises de folhas, raízes e grãos estão sendo iniciadas. Em um outro estudo tenta-se a caracterização de vinhos, produzidos pela própria EMBRAPA, através da técnica de RPE. Medidas preliminares mostraram a presença de ions de  $\text{Mn}^{2+}$  e  $\text{Fe}^{3+}$ .

RES/11:55/6A.F

**ANÁLISE DE FUNGICIDA CÚPRICO POR RPE** R.A.S. Bleiser, N.V. Vugman (Instituto de  
Física-UFRJ) e J.O. Figueiredo Villar (Seção de Química IME-UJ).

A fungicida  $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_8\text{Cu}$ , complexo de cobre do ácido dehidroascórtico, foi analisado por RPE (Ressonância Paramagnética Eletrônica) em banda-X no estado sólido (em forma de polícrstais) e dissolvido em clorofórmio.

Nas amostras policristalinas o  $\text{Cu}^{2+}$  apresenta um tensor  $g$  com componentes aproximadamente independentes da temperatura dadas por  $g_{\perp} = 2,251$  e  $g_{\parallel} = 2,058$ .

A análise dos espectros das amostras em solução à várias temperaturas está sendo feita e destacam-se os seguintes aspectos:

(i) O valor da constante de acoplamento hiperfino isotrópica para a solução não congelada, em temperatura ambiente, é dada por  $A_{iso} = 76\text{G}$  sendo  $g=2,129$ ;

(ii) Acima de 270K as linhas do  $\text{Cu}^{2+}$  apresentam um efeito de relaxação spin-spin dependente da temperatura;

(iii) Abaixo dessa temperatura observa-se uma modificação dos espectros devida ao efeito de "slow-tumbling";

(iv) Medidas a temperatura de nitrogênio líquido, para uma análise mais completa do sitio omio está localizado o  $\text{Cu}^{2+}$ , estão sendo realizadas, inclusive medidas na banda  $\langle\Gamma\rangle$ .

RES/PAINEL

ESTABILIDADE TÉRMICA E MEIA VIDA DE DEFEITOS PARAMAGNÉTICOS PRODUZIDOS PELA RADIAÇÃO IONIZANTE EM CALCITAS NATURAIS: IMPLICAÇÕES A GEOGRONOLOGIA POR EPR

A.Ronsi<sup>1</sup>, G.Roupeau<sup>1,2</sup>, A.Rivera<sup>1</sup>, J.Danon<sup>1</sup> (Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas<sup>1</sup> e Institut Dolomieu e U.A. 69 CNRS, Grenoble/França<sup>2</sup>).

A radiação natural produz, em calcitas, centros paramagnéticos que podem ser detectados por EPR. Espectros de amostras irradiadas no laboratório com raios  $\gamma$  são similares aos espectros de amostras irradiadas pela radioatividade ambiente e raios cósmicos.

Realizamos experiências de aquecimentos isotérmicos em calcitas entalagníticas naturais não irradiadas (caverna Arago-França) e irradiadas no laboratório (caverna Santana-São Paulo). Investigamos o comportamento térmico das espécies  $h_1$  e  $h_3$ , geralmente utilizadas na geocronologia por EPR. Observamos que: 1) em uma das amostras, como é previsto pelo modelo de Yokoyama et al (1982) os elétrons associados à linha  $h_3$  se redistribuem nos sítios  $h_1$ ; entretanto esta redistribuição não ocorre em outras calcitas. 2) o defeito associado à  $h_3$ , possui energia de ativação e fatores pre-exponencial que podem variar de amostra para amostra de  $1.3\text{eV}$  a  $1.5\text{eV}$  e  $6.9 \times 10^{12}$  a  $1.4 \times 10^{12}$  respectivamente. Como consequência destes valores a meia vida para os elétrons  $h_3$  a  $150^\circ\text{C}$  pode então variar de  $5 \times 10^4$  a  $2 \times 10^6$  anos. Discute-se no trabalho as implicações destes resultados na datação por EPR.

Yokoyama, Y et al C. R. Acad. Sci. Paris 294, 759 (1982).

**RES/PAINEL**

**RESONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DO  $^{157}\text{Gd}$  EM  $\text{GdAl}_2$**

I. S. Oliveira<sup>\*</sup>, K.H.B. Alves, UFES, e A.P. Guimaraes, CBPF

A RMN do  $^{157}\text{Gd}$  ( $I=J/2$ ) em  $\text{GdAl}_2$  permite estudar as interações hiperfinais e a relaxação nuclear no núcleo de uma terra rara estado S, em um sítio de alta simetria.

O espectro hiperfino obtido a 4.2 K consiste de um pico estreito (largura aproximadamente de 0.1 MHz) centrado em  $27,05 \pm 0,02\text{MHz}$  com dois satélites quadrupolares afastados cerca de 0,7 MHz. A origem do gradiente de campo elétrico sentido pelo núcleo do gadolinio é uma questão controvérsia, sendo em parte explicada pela contribuição dos elétrons não-S (5d e 6p) presentes neste sítio.

Estamos estudando a relaxação nuclear no  $^{157}\text{Gd}$  em função da potência da rf aplicada. O tempo de relaxação T1 é medido a partir dos ecos estimulados e T2 obtido pela sequência de Hahn. Observamos que os tempos medidas dependem da potência, efeito que está associado à diferença entre os processos de relaxação nos domínios e nas paredes de Bloch. Uma variação de um fator de 100 na potência aplicada corresponde a um fator da ordem de 2 em T2 a 4,2 K.

<sup>\*</sup>Aluno de mestrado do CBPF

**SEMICONDUTORES**

**Coord.: Adalberto Fazzio (IFUSP)**

**SEM/3:00/4A.F** IMPLANTAÇÃO DE IONS DE Au EM GaAs: MEDIDA DA DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL E SUA EVOLUÇÃO COM TRATAMENTOS TÉRMICOS. C.A. Olivieri (D. Física - UFSCar - São Carlos - SP), R.P. Livi (I. Física - UFRGS - Porto Alegre - RS), F.C. de Prince (I. Física - UNICAMP - Campinas - SP) e J.C. Galceran (D. Física - UFSCar - São Carlos - SP)

Foram implantadas amostras de GaAs com íons de  $^{197}\text{Au}^+$ , com energia de 200 keV e dose igual a  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , visando os seguintes objetivos: (i) comparar o alcance projetado  $R_p$  e o desvio padrão da distribuição espacial dos íons implantados  $R_s$ , com as previsões teóricas calculadas pelo programa TRIM (Transport of Ions Matter), desenvolvido por Biersack e Haggmark; (ii) verificar a difusão do Au implantado, após tratamento térmico de 1 hora, a 150, 200, 300, 400, 500 e 600 °C. A técnica de medida foi a de Espectroscopia de Retiro-espalhamento de Rutherford (RBS), com partículas alfa de 800 keV espalhadas a 160° em relação à direção do feixe incidente. Os resultados obtidos foram:  $R_p = 540 \text{ \AA}$  e  $R_s = 340 \text{ \AA}$ . Os resultados dos tratamentos térmicos mostram que até 300 °C não ocorreu nenhuma difusão do Au. Já a 400 °C, o perfil se tornou mais largo e sofreu um leve corrimento em direção à superfície. Uma medida de canalização (channeling) mostrou que parte da camada amorfizada pela implantação havia sido recristalizada. Este efeito tem sido observado em amostras tratadas por mais de 30 minutos, a partir de 350 °C. Após o tratamento a 500 °C, 70% do Au segregou para a superfície, e a recristalização da camada amorfa foi quase total. Finalmente, a 600 °C, todo o Au segregou para a superfície da amostra. Destes resultados preliminares, podemos concluir que o Au basicamente não difunde no GaAs, e que o deslocamento observado a partir de 400 °C não é térmico e sim provocado pelo movimento da interface cristal-amorfo em direção à superfície.

**SEM/8:20/4A.F** SISTEMAS DE U-NEGATIVO EM IMPUREZAS DE METAIS DE TRANSIÇÃO EM SEMICONDUTORES. Zonaldo Mota (Universidade Federal de Santa Maria) e Adalberto Fazzio (Universidade de São Paulo - São Paulo).

Usando o formalismo de Baldass-Anderson estudamos a possibilidade de obter sistemas de U-negativo em impurezas de metais de transição em semicondutores. É proposto, mesmo sem incluir a interação elétron-rede, a ocorrência de U-negativo como consequência da hibridização impureza-hospedeiro para explicar porque alguns estados de oxidação podem estar desaparecidos nestes sistemas.

**SEM/8:40/4A.F** IMPUREZAS DE METAIS DE TRANSIÇÃO EM LIGAS DE COMPOSTOS III-V Ricardo Pinto-nei, Vivilli Maria Silva Gomes e José Roberto Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Estudamos o comportamento de impurezas de metais de transição em ligas de compostos III-V em função da composição da liga. Estamos considerando inicialmente a liga de  $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$  e os contaminantes metálicos Cu, Fe e Mn, bastante comuns nestes materiais. Utilizamos o modelo de aglomerado molecular dentro do método de espalhamento múltiplo - Xa . (CNPq)

**SEM/9:00/4A.F** ESTUDO DE NÍVEIS PROFUNDOS EM GaAs CRESCIDO POR MOCVD - Márcio A.A.  
Fudonal e Américo S. Inahata - IFGW-UNICAMP.

Usando Espectroscopia do Transiente de Nível Profundo (OLIS), estudamos amostras de GaAs tipos n e p, crescidas por MOCVD no CPqD de Telebrás e Vácuo-MOCVD no LPD-UNICAMP, respectivamente.

Os resultados mostraram a presença de níveis profundos próximos à metade da banda proibida. Alguns destes níveis podem ser identificados com níveis conhecidos na literatura, tais como o EL2 e o devido a cromo. Outros têm origem desconhecida. (Telebrás, Fapesp, CNPq).

**SEM/9:20/4A.F** CONDIÇÕES DE CONTORNO CRYSTALINOS NO CÁLCULO DE DEFEITOS EM SEMICONDUTORES:  
APLICAÇÃO AO SELENETO DE ZINCO. Paulo S. Guimarães, MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, CP: 515 - 12201 - São José dos Campos, SP, Brasil; e Manoel L. de Siqueira, Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

Condições de contorno cristalinos foram desenvolvidos para a obtenção da estrutura eletrônica de defeitos em semicondutores pelo método autoconsistente do espalhamento múltiplo ( $Mn - X_a$ ). Este modelo foi aplicado ao cálculo de alguns defeitos no selêneto de zinco.

**SEM/9:40/4A.F** ESTRUTURA ELETRÔNICA DE IMPUREZAS DE METAIS DE TRANSIÇÃO 3d EM ZnSe - Hélio Chacham, J.L.A. Alves e M.L. De Siqueira, Departamento de Física, ICEX, UFMG, CP 702, Belo Horizonte, MG, Brasil.

Efetuamos cálculos auto-consistentes para a estrutura eletrônica de impurezas de metais de transição 3d em ZnSe com o uso do método de espalhamento múltiplo. As impurezas introduzem níveis monoelétronicos de simetria E e  $T_2$  na faixa proibida e ressonâncias correspondentes na faixa de valência. Os níveis da faixa proibida mostram um comportamento monotônico na série, o que é consistente com resultados experimentais "expurgados" de efeitos de multipletos<sup>(1)</sup>.

(1) A. Fazzio, M.J. Caldas, and A. Zunger, Phys. Rev. B 30, 3430 (1984)

**SEM/10:15/4A.F** "CARACTERIZAÇÃO DE CENTROS DE RECOMBINAÇÃO PROFUNDOS EM CdSe POLI-CRISTALINO". M.J.S.P. Brasil, F. Decker e Paulo Motisuke - IFGW - UNICAMP e J.R. Moro - CPqD - Telebras

Estamos investigando filmes policristalinos de CdSe para a fabricação de células solares fotoeletroquímicas. Este trabalho consiste basicamente na caracterização destes filmes por espectroscopia de fotoluminescência e faz parte de um programa de otimização das células.

No espectro de emissão infravermelha destas amostras, observamos duas bandas, com picos em  $\lambda_m = 1.20 \mu\text{m}$  e  $\lambda_m = 0.95 \mu\text{m}$ . Numa análise dos resultados experimentais usando um modelo baseado em coordenadas de configuração, determinamos os parâmetros característicos dos centros de recombinação correspondentes. Propomos também algumas explicações sobre suas origens.

**SEM/10:35/4A.F** TITÂNIO INTERSTICIAL EM SILÍCIO

George Balazar Martins e Gaston Eduardo Barbaria.

Departamento de Eletrônica Quântica (Instituto de Física da UNICAMP).

Estamos calculando TI intersticial em Silício, usando o método tight-binding semi-empírico e o método da Função de Green. Os elementos da matriz de acoplamento do cristal puro com a impureza, bem como as auto-energias dos orbitais "d" da impureza são calculados usando os parâmetros de Harrison ( $d^+$ ). Estamos comparando com cálculos "ab initio" (ASW) usando função de Green não auto-consistente.

**SEM/10:55/4A.F** EFEITOS DE PRESSÃO UNIAXIAL NA ENERGIA DE LIGAÇÃO DE ESTADOS D<sup>-</sup> EM Ge:Sb e Ge:As. Gerald Weber e Luiz Eduardo Oliveira, Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas.

O cálculo da energia de ligação de estados D<sup>-</sup> em Ge:Sb e Ge:As sob pressão uniaxial<sup>1</sup> no longo da direção [111] é feito através de um esquema variacional na aproximação de massa-efetiva e utilizando uma função envelope - para os dois elétrons do estado D<sup>-</sup> - do tipo proposto por Chandrasekher. Correções do tipo vale-órbita, interação elétron-elétron e efeitos de pressão uniaxial são consideradas com o mesmo tipo de formalismo utilizado recentemente<sup>2</sup> no caso do Si:P e Si:As sob pressão uniaxial na direção [001].

Referências:

1. M. Taniguchi e S. Narita, J. Phys. Soc. Jap. 43, 1262 (1977).
2. L.E. Oliveira e L.M. Falicov, Phys. Rev. B33, 6990 (1986).

**SEM/11:15/4A.F CARACTERIZAÇÃO DE GaAs IMPLANTADA COM Mo - Fernando Tikawa, Paulo Motisuke, Francisco Prince - UNICAMP e Israel Baumvol - UFRS**

Substratos de GaAs tipo n com dopagem residual de  $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  foram implantados com íons de Mo<sup>+</sup> a  $\sim 100$  KeV. Isto resultou numa distribuição de dopagem com pico a  $\sim 200$  Å de profundidade e concentração média  $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Ativação dos íons foram feitos por tratamento térmico a  $850^\circ\text{C}$  por 30 minutos numa ampola fechada contendo uma atmosfera de As. Apresentaremos resultados de caracterização destas amostras utilizando técnica de fotoluminescência a baixa temperatura.

**SEM/11:35/4A.F ESTUDO DE CAMADAS EPITAXIAIS DE GaAlAs:Sn POR MEDIDAS DE FOTOLUMINESCÊNCIA. H.Romero Montesinos, J.F. von der Weid (Departamento de Física-PUC-RJ) Mario T. Furtado (CPqD-TELEBRAS).**

Serão apresentadas medidas de fotoluminescência na faixa de temperaturas entre 63.3K e 300K em camadas epitaxiais de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As:Sn}$ , as quais são usadas como camadas passivas em lasers de heteroestrutura dupla. A baixa temperatura (Pto. triplo N<sub>2</sub>) na região próxima ao gap foram observadas três bandas: a transição banda-banda, a recombinação radiativa devido à presença de impurezas residuais associada à transição banda de condução-acelitador raso, identificada como impureza residual carbono e uma transição envolvendo um complexo de natureza não identificada na literatura consultada. Na região de baixa energia observa-se a re-emissão proveniente do substrato e uma banda larga em 1,51eV associada à impureza de Sn. Variando a temperatura é possível calcular a energia de activação de alguns dos centros radiativos e a resolução de duas bandas a T. ambiente consegue-se pela variação da intensidade da excitação.

**SEM/11:55/4B.F PROPRIEDADES ÓPTICAS DOS SEMICONDUTORES SEMIMAGNÉTICOS. Mauro R.Sardella Jr e Adalberto Fazzio Instituto de Física - Universidade de São Paulo.**

A origem da absorção em cerca de 2.1 eV no material semimagnético Cd<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Ta tem sido objeto de discussão. Embora a teoria de Tanabe-Sugano apresente dificuldades para sua interpretação como sendo uma transição intra-d  $^6A_1 \rightarrow ^4T_1$ , a aplicação do método de multipletos (Fazzio et al., 1984), calculando a energia desta transição em termos dos parâmetros de deformação orbital  $\lambda_e$  e  $\lambda_t$ , do "splitting"  $\Delta_{eff}$  do campo cristalino e dos parâmetros de Racah iônicos, propicia um estudo da consistência desta hipótese. O cálculo da variação, com a pressão hidrostática, da energia assim obtida, recai na análise da dependência de  $\lambda_e$ ,  $\lambda_t$  e  $\Delta_{eff}$  também com a pressão.

SEM/8:00/5A.F

ESTADOS ELETRÔNICOS NA CONFIGURAÇÃO DE CAMPOS CRUZADOS-(ExB).

VALMIR A. CHITTA, ARAHAM M. COHEN-(Instituto de Física e Química de São Carlos-USP) e GILMAR E. MARQUES-(Universidade Federal de São Carlos).

A configuração de campos cruzados é fundamental para o estudo de propriedades de transporte em semicondutores e seu melhor exemplo de aplicações é o efeito Hall quantizado. Recentes aplicações em MOSFETs(1) e em Quantum Wells(2) demonstraram e revelaram situações físicas de grande interesse. Algumas características do movimento de portadores em poços quânticos na configuração de campos cruzados serão estudadas usando o método k.p. Aspectos da geometria, acoplamento e degenerescência na estrutura eletrônica serão também abordados.

(1) W.Zawadzki,S.Klehm and U.Merkel,Phys.Rev.B,33,6918(1986)

(2) G.M.G.Oliveira,V.M.S.Gomes and J.R.Leite,Phys.Rev.B.( to be published).

SEM/8:20/5A.F

ELECTRON-PHONON INTERACTION EFFECTS IN A QUASI-TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS IN GaAs-Ga<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As HETEROSTRUCTURE. Marcos H. Degani and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

From a single electron theory it is well established that the polaron effective mass in purely two-dimensional systems is larger than the corresponding three dimensional case. On the other hand, recent cyclotron resonance experiments have shown that the polaronic mass in two-dimensional GaAs heterostructure is a factor of 3 smaller than the three dimensional results. In order to understand the discrepancy between the experiments and this simple theory we have improved the model by taking into account the electron interaction with both interface and longitudinal bulk phonons. We have also included in the calculation the effects of the electron screening within the random-phase-approximation formalism and the electron subband wave function. In contrast to previous works we have shown that the interface phonons give significative contribution to the polaronic energy and effective mass and obviously can not be neglected. The results of our calculations for the polaron mass correction are in excellent agreement with the experiment measurements.

SEM/8:40/5A.F

MANY-BODY PROBLEM IN QUANTUM WIRES IN GaAs-GaAlAs. Vera B. Campos (Universidade Federal de São Carlos), Marcos H. Degani and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

The ground-state properties of a quasi-one-dimensional electron gas.. in quantum wires in GaAs-GaAlAs are investigated on the basis of a theory where the short-range correlations are present through a local-field correction. This approach can be seen as one of the most successfull improvements of the Random Phase Approximation (RPA). We present results for the pair correlation functions, exchange and correlation energies as well as for the plasma dispersion relation in comparison to the RPA values.

**SEM/09:00/5A.F** EXCITON BINDING ENERGY IN QUANTUM WELL WIRES. Marcos M. Degani and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

The binding energies of excitons in quantum well wires of GaAs surrounded by  $Ga_xAl_{1-x}As$  are calculated with the use of variational solutions to the effective-mass equation. The results we obtained show that the energies are dramatically dependent of the sizes of the wire, and also that its magnitude is greater than in comparable quasi-two-dimensional quantum well structures.

**SEM/09:20/5A.F** ESTUDOS DE INTERFACES METAL-SEMICONDUTOR - J.C.Gelzerani, J.O.Freire, C.Constantino, C.A.Olivieri (D.F.-UFSCar), J.B.B.Oliveira e F.C. de Principe (IFGW - Unicamp).

Estamos empenhados na verificação das propriedades das interfaces entre metais (e ligas metálicas) e semicondutores compostos do grupo III-V (GaAs, InP, GaSb). O caráter rotificador ou ôhmico para diversos pares metal-semicondutor está sendo investigado. Estudos são realizados sobre as propriedades da fabricação (metalização, "alloying", difusão ou implante de dopantes, limpeza dos substratos) que influem nas propriedades dos dispositivos.

A caracterização elétrica é feita a partir de medidas de  $I \times V$  e  $C \times V$ . Para os contatos ôhmicos, estamos analisando técnicas para obtenção da resistência específica de contato  $R_c$ . Análises sobre reprodutibilidade e degradação estão sendo iniciadas. Effórcos estão sendo desenvolvidos para obtenção de informações sobre a estrutura de interface, por Rutherford Backscattering (IF-UFRGS) e espectroscopia Auger (CDPPE).

**SEM/09:40/5A.F** EXCITONS TRAPPED IN IMPURITIES: THE BOUNDED-UNBOUNDED PHASE TRANSITION- J.B.M. Hornos, M. Degani and Oscar Hipólito - IFQSC/USP

Excitons can be trapped to impurities in some semiconductors. Assuming that the effective mass approximation is valid the three-body problem can be solved using hyperspherical coordinates with good accuracy using the simplest adiabatic approximation. The relation between the hole and electron mass play a fundamental role in the obtention of the ground state energy. If the mass relation is above a threshold value the system is bounded and the mean radius is finite. In the other case there is no bound state. This phase transition is investigated and the critical exponent  $\beta-\epsilon = (\alpha_m)^{1/2}$  is calculated. We also compare the wave function in the two different phases.

**SEM/10:15/4A.F ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SUPER-REDES.** Armando Corbani Ferraz (Instituto de Física da USP)

Estudos teóricos das super-redes  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$ ,  $(\text{ZnSe})_n(\text{GaAs})_m$  e  $(\text{InAs})_n(\text{GaSb})_m$ , dentro do esquema de densidade local através do método pseudopotencial. Aspectos referentes à estrutura ultrafina ( $n = m = 1$ ) enfatizam o fato de se distinguir as estruturas de ligas ordenadas do tipo  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  e  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

**SEM/10:35/5A.F ESPALHAMENTO DO ZDEC POR FONONS EM POÇOS QUÂNTICOS SUBMETIDOS A CAMPOS MAGNÉTICOS FORTES.** C.E.S. Leal, I.C. da Cunha Lima, MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais, CP: 515, 12201 - São José dos Campos, SP; e A. Troper, CNPq/Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ.

Estuda-se o espalhamento de elétrons ocupando bandas de Landau (largura da banda causada por impurezas) por fonons superficiais na interface de poços quânticos. Discute-se a viabilidade desta interação em função da arquitetura do poço. As resistividades  $\rho_{xx}$  e  $\rho_{xy}$  são obtidas a partir das equações de Kubo utilizando-se o formalismo de função memória.

**SEM/10:55/5A.F DIFUSÃO DE AD-ÁTOmos EM INTERFACES.** I.C. da Cunha Lima, MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais, CPostal 515, 12201, SJCampos, SP; A. Troper, CNPq/Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ e S. C. Ying, Department of Physics, Brown University, USA.

A difusão de ad-átomos em uma superfície é estudada usando-se um modelo de pequeno polaron (Small Polaron Model). Utiliza-se o formalismo de função memória para o cálculo do coeficiente de difusão de acordo com a fórmula de Kubo. Mostra-se que, usando-se uma separação conveniente para a função de correlação corrente-corrente, obtém-se tanto o termo conhecido como difusão por "hopping" quanto ao mecanismo de condução por banda, a depender do intervalo de temperatura considerado.

**SEM/11:15/5A.F** POLARONS EN FILMES DE SEMICONDUTORES POLARES. G.A.Farias<sup>\*</sup>, M.H.  
Degani<sup>\*\*</sup> e O.Hipólito<sup>\*\*</sup> - \*Departamento de Física-UFC-Fortaleza-  
Ceará - 60.000 \*\*Departamento de Física e Ciências dos Materiais-USP-São Carlos-  
SP. 13.560.

Considerando um filme de um semicondutor polar, depositado sobre um substrato, calculamos a energia do estado fundamental de um polaron confinado neste filme. Na interação elétron-fonon consideramos que o elétron interage com os modos de volume (LO) e de superfície (SO). A energia do polaron é calculada para vários tipos de semicondutores, como função da espessura do filme.

**SEM/11:35/5A.F** STATISTICAL PROPERTIES POLARONS IN QUASI-ONE-DIMENSIONAL SEMICONDUCTORS STRUCTURES. Marcos H. Degani and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

In a semiconductor heterostructure which confines electrons to one dimensional the characteristics of the scattering mechanisms are significantly modified leading to an enhancement in the mobility. In this work, we discuss the interaction of the one-dimensionally confined electrons with polar-optical phonons at finite temperature, in quantum well wires of GaAs-GaAlAs. By using Feynman's path-integral formalism we have calculated the free energy, self energy, effective mass, entropy and specific heat of the polaron as a function of temperature and the sizes of the wire.

**SEM/11:35/5A.F**

#### CARATERIZAÇÃO DE CAMADAS DE InGaAsP POR ESPECTROSCOPIA DE MODULAÇÃO

José Luis Herrera Pérez - Navin B. Patel

Instituto de Física "Gleb Wataghin" UNICAMP  
13081 Campinas - SP - Brasil

Usando fotorreflétancia à temperatura ambiente estudou-se ligações quaternárias de In, -Ga, As, -Py crescidas por epitaxia em fase líquida, para determinar o valor preciso do gap ( $E_g$ ) e o parâmetro de alargamento ( $\eta$ ) dos espectros obtidos e que parece ter ligação com o casamento do parâmetro de rede. A forma de linha dos espectros foram ajustados a forma funcional da teoria derivada.

Discute-se os resultados em função das condições de crescimento, da composição das ligações e o casamento do parâmetro de rede.

SEM/8:00/6A.F

EFEITOS DOS TRATAMENTOS TÉRMICOS SOBRE AS PROPRIEDADES ÓPTICAS DE  
e-Si<sub>x</sub>:H. J.I. Cisneros, J.H. Dias da Silva, M.P. Cantão, F.C. Marques. Instituto  
de Física - Unicamp - CP 6165 - 13081 Campinas, SP. e A. Donnadieu Laboratoire  
de Spectroscopie II, CNRS, Université des Sciences et Techniques du Languedoc,  
Place Eugène Bataillon, 34060 Montpellier, France.

As propriedades ópticas de nitreto de silício amorfo hidrogenado, depositado  
pelo método de Sputtering RF, foram determinadas em função da temperatura de medi-  
ção e após tratamentos térmicos a várias temperaturas. O índice de refração e o  
coeficiente de absorção foram calculados a partir de espectros de transmissão e re-  
flexão. Foram observados efeitos térmicos reversíveis e irreversíveis nos valores  
do gap óptico E<sub>g</sub> e do índice de refração estático n<sub>0</sub>.

Variações correlacionadas de E<sub>g</sub> e n<sub>0</sub>, medidos a diferentes temperaturas, tam-  
bém foram observadas. Delas resulta um decréscimo aproximadamente linear de n<sub>0</sub> em  
função de E.

SEM/8:20/6A.F

LASER DE SEMICONDUTOR COM PERFIL DE GANHO INVERTIDO E JUNÇÃO  
TRANSVERSAL. J.F.T. Giglio, M.M.G. da Carvalho, F.C. da Prince, N.B. Petel - Unicamp  
- IFGW/LPD.

O laser convencional (contato de feixe) de semicondutor não apresenta um  
bom confinamento ótico no plano da junção. Dentre as opções que se apresentam pa-  
re melhorar este confinamento, a junção transversal, que confina ópticamente o  
feixe luminoso à espessura de uma camada epitaxial (< 1 μm), e o laser de perfil  
de ganho invertido que se utiliza de uma injeção lateral, são das mais promisso-  
res.

Para a fabricação destes dispositivos, é necessário um bom conhecimento da  
técnica de difusão de impurezas em semicondutores bem com o domínio da técnica  
de crescimento epitaxial à partir de fase líquida (LPE).

Procuraremos mostrar os passos que estão sendo seguidos na fabricação e otí-  
mização destes tipos de dispositivos.

(FINANCIAMENTO TELEBRÁS)

SEM/8:40/6A.F

MEDIDA DE DESCONTINUIDADE NA BANDA DE CONDUÇÃO COM RELAÇÃO À VA-  
RIAÇÃO DA BANDA PROIBIDA EM HETEROJUNÇÕES n-n DE GaAlAs - Mario T. Furtado, Maria  
Salete S. Loural, Antonio C. Sacha - CPqD-TELEBRÁS.

O perfil da concentração de portadores em uma heterojunção (HJ) n-n fornece uma  
medida direta da descontinuidade na banda de condução ( $\Delta E_c$ ) [1]. Publicações recen-  
tes reportam o valor  $\Delta E_c/\Delta E_g = 0,6$  ( $\Delta E_g$  = diferença das bandas proibidas da cada  
lado da HJ) para HJs tipo GaAs:Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As para qualquer valor de x. Neste tra-  
balho realizamos essas medidas em HJs n-n do tipo Ga<sub>0,22</sub>Al<sub>0,08</sub>As:Ga<sub>0,55</sub>Al<sub>0,45</sub>As por  
C-V eletroquímico, que apresenta a vantagem, em relação ao C-V convencional, de  
nos permitir atingir profundidades maiores, longe da HJ, sem alterar a tensão  
aplicada. As amostras analisadas foram crescidas por epitaxia a partir da fase li-  
quida. A concentração de portadores é da ordem de  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  na camada de banda  
proibida menor e  $10^{18}$  ou  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  na de banda proibida maior. As energias das ban-  
das proibidas foram medidas por fotoluminescência. Os resultados de  $\Delta E_c/\Delta E_g$  estão  
entre 0,5 e 0,54eV, muito próximos dos valores mais recentes publicados para  
GaAs:GaAlAs. Uma estimativa da densidade de cargas interfacial também foi feita.

1- H. Kroemer, H. Y. Chien, J. S. Harris Jr., D. D. Edwall - Appl. Phys. Lett.  
36, 295 (1980).

**SEM/9:00/6A.F "CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE GaAs CRESCIDOS POR MOCVD EM VÁCUO".**

Ayrton André Bernussi e Paulo Motisuke - IFGW - UNICAMP

Foram caracterizados, através de fotoluminescência à baixa temperatura, filmes de GaAs não dopados crescidos por MOCVD em vácuo. Estas amostras foram crescidas à diferentes temperaturas do substrato e razões de fluxo As/Ga (ou razão V/III). Os resultados obtidos demonstram que o carbono é o aceitador residual predominante. A resolução das diversas linhas de exciton ligado, indica uma baixa concentração de impurezas residuais ( $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ). Foi apresentado também uma correlação entre as condições de crescimento e as intensidades de fotoluminescência.

**SEM/9:20/6A.F DESENVOLVIMENTO DE LASERS SEMICONDUTORES DE GaAs PARA COMUNICAÇÕES ÓPTICAS.**

- A.C.Sache, C.A.Loural, R.G.Pereira, J.S.Pereira, R.Amoral, N.Patel, A.C. Bordeaux Rego - CPqD-TELEBRAS - Campinas-SP.

Neste trabalho é apresentado o desenvolvimento de laser de GaAlAs/GaAs para aplicação em Comunicações Ópticas. Estruturas de lasers de guiaamento por ganho, de tipo contato de faixa em  $\text{SiO}_2$  e estrutura de canal em "v", foram desenvolvidas objetivando eliminar tensões mecânicas causadoras de defeitos que provocam a degradação do laser. Os dispositivos são fabricados utilizando-se técnica de crescimento epitaxial de fase líquida, deposição de dielétrico por sputtering, formação de canal no semicondutor por fotolitografia, e difusão. Dependendo da largura da faixa de confinamento de corrente, os lasers operam no modo fundamental, eliminando instabilidades nas suas características eletro-ópticas (kink, auto-pulsação), mantendo-se a corrente limiar na faixa de 60 a 100mA.

Estudos de degradação acelerada nos lasers mostram que, com métodos adequadados de seleção, obtém-se dispositivos com tempo de vida maior que 100.000 horas, emitindo 3mW na temperatura ambiente.

Esta tecnologia é objeto de transferência para Indústria Nacional de Semicondutores.

**SEM/9:40/6A.F "ESTUDO DAS TRANSIÇÕES ORDEM-DESORDEM EM LIGAS SEMICONDUTORAS ATRAVÉS DO**

**CÁLCULO DE ENERGIAS TOTAIS". Belita Koiller, (PUC/RJ), Mark Robbins, (Johns Hopkins U.), Roberto Osório, (UnB), Maria A. Davidovich, (PUC/RJ)**

Algumas ligas semicondutoras  $(\text{III}-\text{V})_{1-x}(\text{IV})_x$  apresentam uma transição zinc-blende-diamond a uma concentração crítica  $x_c \approx 0.3$ . Esta transição deve-se provavelmente a efeitos de correlação entre as espécies atômicas que influenciam o processo de crescimento epitaxial na direção (100). Ligas do tipo  $(\text{III})_{05}(\text{III}')_{05}$  V também exibem uma transição na qual os átomos das espécies III se ordenam na estrutura tetragonal simples (tipo CuAu-I na sub-rede cationica), sendo esta transição de origem termodinâmica, pois independe da direção de crescimento epitaxial. Estamos calculando as energias totais de formação a fim de determinar o diagrama de fase destes sistemas. No caso da transição termodinâmica, a entropia configuracional é calculada na aproximação de Kikuchi.

**SEM/10:15/6A.F** MAGNETIC PROPERTIES OF THE IMPURITY BAND. Sergio S. Makler, Maria Franca Ferioli and Enrique V. Anda (Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense).

A simple model is developed to study the magnetic properties of impurities in doped semiconductors at intermediate concentrations. The exchange interaction between hydrogen-like atoms is antiferromagnetic for all distances. As a consequence of the frustration introduced by disorder, for low concentrations and low temperatures the material is believed to be a spin glass.

The system is described by a Hubbard Hamiltonian in which the interaction is treated in the Unrestricted Hartree-Fock approximation (UHF). The disorder, is approximated by supposing that the average number of neighbours is large.

At zero temperature the material goes through several transitions when doping increases. For low concentrations it has a spin glass insulator phase, then it suffers a transition to spin glass "metallic" phase and after that to non-magnetic "metallic" one. Finally the material becomes a true conductor when the Fermi level crosses the mobility edge. This last transition is not described in our model because we did not study localization.

Densities of states, specific heat and magnetic susceptibility for several concentrations are presented.

**SEM/10:35/6A.F** RFE DE GADOLINIUM EM SILÍCIO ANORPO<sup>a</sup>. J. B. Castilho, F. C. Marques, P. Alvarez, C. E. Barberis, I. Chambouleyron e C. Rettori. (Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP)

Verificou-se a primeira observação por ESR de Cd em a-Si. As amostras foram preparadas pelo método de co-sputtering na forma de filmes finos ( $2 \times 20 \times 10^{-3}$  mm<sup>3</sup>). As concentrações nominais de Cd (Cc<sub>d</sub>) foram estimadas pelas razões entre as áreas dos alvos Cd/Si e as taxas individuais de "sputtering" correspondentes. Os experimentos de ESR em Banda-X à temperatura ambiente mostraram que para baixas concentrações de Cd (0.05% < Cc<sub>d</sub> < 0.3%) o espectro consistia de uma única linha de ressonância com o valor de g=2.085 ± 0.005 e a largura de linha ΔH=63 ± 10 gauss. Para altas concentrações (0.6% < Cc<sub>d</sub> < 3%) os espectros mostraram também uma única ressonância com o valor de g=2.00 ± 0.03 e uma largura de linha dependente da concentração ΔH=800+(80×Cc<sub>d</sub>) gauss. Para amostras de baixa concentração (Cc<sub>d</sub><0.3%) observou-se que a intensidade de ressonância correspondente aos "dangling bonds" (g=2.005 ± 0.0005; ΔH=7.5 ± 1 gauss) diminui conforme a concentração de Cd é aumentada. Isto sugere que os átomos de Cd estão transferindo elétrons para os "dangling bonds", emparelhando-os. Portanto acreditamos que no limite de muita diluição, os átomos de Cd, isolados, estão no estado Cd<sup>3+</sup> 4f<sup>7</sup>. A ressonância larga observada em amostras de alta concentração pode ser atribuída ao agrupamento de Cd. Agrupamentos de Cd são responsáveis pelo ordenamento antiferromagnético observado em experimentos de susceptibilidade magnética em Cd dissolvido em silício cristalino.

<sup>a</sup>Parcialmente financiado pela FAPESP e CNPq.

**SEM/10:55/6A.F** CARACTERIZAÇÃO ELETRICA DE CAMADAS EPITAXIAIS DE In Ga As P  
0,71 0,28 0,83 0,37

-Suhaila Maluf Shibli e Mauro Monteiro Garcia de Cervelho - Unicamp - IFGd - L.P.D

Neste trabalho estudou-se as propriedades de transporte de cargas em ligações quaternárias semicondutores através de medidas de efeito Hall e resistividade entre 4.2K e 300K.

Para isto, utilizamos a Regra de Matthiessen e os valores teóricos das mobilitades limitadas pelos espalhamento por impurezas ionizadas, fôtons ópticos polares e desordem no potencial de rede, conseguindo assim, calcular a mobilidade teórica total, cuja curva ( $\mu_t \times 10^3 / 1$ ) é bem interpolada pelo mobilidade experimental. Realizamos, também, os cálculos de densidade de impurezas ionizadas (Ni) e do potencial de espalhamento por desordem no potencial de rede (ΔUi). Os valores de ΔUi determinadas estão de acordo com a teoria que a associa à diferença de energias das bandas proibidas dos materiais constituintes da ligação.

**SEM/11:15/6A.F** SCREENED IMPURITY BOUND STATES IN Si MOS STRUCTURES. Harcelo Z. Minalle, Marcos H. Deguchi and Oscar Hipólito (Instituto de Física e Química de S. Carlos, USP).

The binding energy of a charged impurity center located inside the oxide and at the interface of a n-type Si inversion layer is calculated through the variational solutions to the effective mass equation. The screening of the impurity by the electrons is taken into account in the Random Phase Approximation (RPA). The calculation is performed by assuming that the first two electrical subbands are occupied. The results obtained are compared to the experimental data recently appeared in the literature.

**SEM/11:35/6A.F** EFEITOS DE DISTORÇÃO E RELAXAÇÃO NA ENTROPIA DE FORMAÇÃO DA VACÂNCIA DE SILÍCIO. Euzébio Conceição F. Silva, Arnaldo Dal Pino Jr. e J.R. Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Estudamos o efeito da vacância isolada sobre a dinâmica da rede em silício. Para tanto, realizamos 3 distintas abordagens da vacância. Inicialmente, desprezamos os efeitos da interação das ligações flutuantes sendo o defeito tratado em simetria tetraédrica. Num segundo estágio, consideramos a relaxação simétrica da rede na região do defeito. Finalmente, incluímos a interação entre os orbitais flutuantes distorcendo o sistema para simetria tetragonal.

Notamos que tanto o efeito da relaxação quanto o efeito da distorção podem atuar no sentido de elevar a entropia de formação da vacância ( $S_f$ ). As consequências da elevação de  $S_f$  e a participação da vacância no mecanismo de autodifusão são discutidas.

Trabalho parcialmente financiado por: FAPESP e FINEP.

\* Departamento de Física do Instituto Tecnológico da Aeronáutica.

**SEM/1153:/6A.F** SUPERFÍCIE DE SEMICONDUTORES. Armando Corbani Ferraz (Instituto de Física da USP)

Estudo da estrutura eletrônica da superfície de semicondutores dos grupos III-V e II-VI utilizando os métodos de energia total e força de Hellman-Feynman. Propriedades na adsorção de metais em superfícies de semicondutores.

**SEM/PAINEL** CARACTERIZAÇÃO DE CAMADAS EPITAXIAIS DE SEMICONDUTORES. Alba Rosa Lopez, Parada e José Carlos Valladão de Mattos - (LPD - IFGW - Unicamp).

Usando o efeito fotocústico-foto térmico é possível medir a espessura de camadas epitaxiais de semicondutores, com a vantagem de não se tratar de um método destrutivo, pedindo assim, utilizar a mesma amostra para a sua caracterização, estudando-se propriedades térmicas e ópticas de cada camada usando a espectroscopia fotocústica - fototérmica.

**SEM/PAINEL** ANÁLISE DA IONICIDADE NOS COMPOSTOS II-b E VI-a. Antonio Sergio C. Esperidião (UFBA/UNICAMP) e José Galvão P. Ramos (Instituto de Física, UNICAMP).

Neste trabalho exploramos a ionicidade dos compostos II-b e VI-a, que apresentam estrutura "ZINC-BLEND" ( $ZnSe$ ,  $ZnS$ ,  $ZnTe$ ,  $CdTe$ ). Calculamos um parâmetro da teoria Tight-Binding que permite descrever o caráter metálico destes semicondutores, sendo fundamental na determinação da forma qualitativa da estrutura de bandas destes compostos.

A técnica empregada baseia-se na expansão da constante dieletrônica em torno de uma frequência média,  $\bar{\omega}$ , a qual é definida convenientemente. A expressão de  $\epsilon_1(0)$  é a seguinte:

$$\epsilon_1(0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \epsilon_2(\omega) d\omega + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_2(\omega)(\bar{\omega}-\omega)}{\omega^2} d\omega \quad (1)$$

A partir dos espectros experimentais da parte imaginária da função dieletrônica, podemos calcular o segundo termo da eq. (1), com a precisão que os dados experimentais permitirem. Este segundo termo será relacionado a estrutura de bandas do semicondutor, usando-se um Hamiltoniano "TIGHT-BINDING" tipo HALL-WILKE, priorizando as interações entre orbitais do mesmo átomo e orbitais de átomos vizinhos. As funções de onda utilizadas serão do tipo WANNIER, considerando combinações lineares de orbitais atómicos (hibridização  $SP^3$ ). Os orbitais "d" nas bandas de valência serão considerado segundo VAN Vechten.

(1) R.H. Mucho, J.G. Ramos and P.A. Wolff, Phys. Rev. B17, 1843 (1978)

(2) J.A. Brum and J.G. Ramos, Solid State Communications, Vol. 52, nº 1 (1984)

**SEM/PAINEL** EFEITO DA ANISOTROPIA EM PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE SEMICONDUTORES. Vera Beatriz Campos (Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos) e Oscar Hipólito (Departamento de Física, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP).

Muitos materiais que tem apresentado grande interesse em pesquisa atualmente apresentam uma forte anisotropia, o que faz com que suas propriedades elétricas variem fortemente de acordo com a direção examinada. Visando entender este problema, aplicamos o método do campo autoconsistente SCFA ao gás de elétrons tridimensional, considerando-se anisotropia nas massas. Nesta aproximação são incluídas as correlações de curto alcance devidas às interações coulombiana e de exchange. Calculamos o fator de estrutura  $S(q)$ , a função de correlação dos pares  $g(r)$ , a energia das excitações  $E(q)$  e a constante dieletrica  $\epsilon(q,\omega)$ . Tais propriedades são calculadas em função do ângulo com o eixo z, da densidade do sistema e da razão entre os valores das massas nas direções paralela e perpendicular ao eixo z. Estes resultados poderão ser comparados com resultados experimentais em materiais anisotrópicos, usando-se para tanto como parâmetros de entrada os valores da constante dieletrica estática e da massa em uma das direções.

**SEM/PAINEL** ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DE UM GÁS DE ELETRONS EM POÇOS QUÂNTICOS DE GaAN-Al. C.A. Ar. Umbrino de Freitas Neto (Universidade Federal da Paraíba) e Marcos H. Degani (IFQSC/USP).

Calculamos a energia do estado fundamental de um gás de eletrons confinados em poços quânticos. Além das correções devidas aos efeitos das correlações eletrônicas incluímos também, a correção na energia devido à interação eletron-fonon longitudinal ótico. Analisamos o comportamento da energia do estado fundamental em função da largura do poço, da densidade eletrônica e da concentração de alumínio.

**SEM/PAINEL** IMPUREZA HIDROGÊNICA EM SISTEMAS SEMICONDUTORES QUASE-UNIDIMENSIONAIS. Franisco A.P. Osório, Marcos H. Degani e O. Hipólito (IFQSC-USP)

A energia de ligação de estados ligados à uma impureza hidrogênica localizada no interior de um fio quântico (quantum wire), formado por uma região quase unidimensional de GaAs envolvida por Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, é estudada em função das dimensões ( $L_x, L_y$ ) do fio, da posição da impureza, da densidade eletrônica e da concentração x de Al.

**SEM/PAINEL** DESORDEM DIAGONAL E NÃO-DIAGONAL EM POÇOS QUÂNTICOS DOPADOS. E. A. de Andrade, E. Silva, I.C. da Cunha Lima, C.E. Santos Leal e A. Ferreira da Silva. MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, Caixa Postal 515, 12201 - São José dos Campos, SP, Brasil.

A densidade de estados de impurezas em poços quânticos tem sido calculada supondo uma desordem apenas diagonal ou apenas não-diagonal na hamiltoniana "tight-binding" do sistema de impurezas distribuídas aleatoriamente. Fazemos, neste trabalho uma discussão mais geral do problema. Determinamos critérios para as aproximações acima e calculamos a densidade de estados para vários perfis de dopagem considerando os dois efeitos.

**SEM/PAJNEL**

**ESPALHAMENTO INTERBANDAS EM UM SISTEMA  
SEMICONDUTOR QUASI - BIDIMENSIONAL**

**Hidembergue O. Frotta - Universidade do Amazonas  
Marcos H. Degani e Oscar Hipólito - IFQSC - USP**

Estudamos um sistema semicondutor quasi-bidimensional levando em consideração os espalhamentos eletrônicos intersubbandas. Tomando o efeito de brindagem na aproximação RPA, analisamos a matriz da função dielétrica, o potencial efetivo, a mobilidade e os espectros de frequência de plasma.

**SEM/PAJNEL ESTRUTURA ELETRÔNICA, EXCITONS E IMPUREZAS EM QUANTUM WIRES. Valmir A. Chitta e Marcos H. Degani (Instituto de Física e Química de São Carlos , USP) e Gilmar E. Marques (Dept. de Física, Universidade Federal de São Carlos).**

Crescimento de heteroestruturas por MOCVD, MBE ou CBE, permite controle preciso de parâmetros tais como dose e/ou local da dopagem, espessura das camadas e principalmente a geometria das heteroestruturas. Assim uma heteroestrutura do tipo "guia de onda" com seção retangular é perfeitamente viável[1,2] hoje, e nela os portadores estão confinados bidimensionalmente e livres em uma única direção. (Quantum Wire). Este sistema, além do interesse teórico tem grande relevância na construção de lasers semicondutores. Aspectos da estrutura eletrônica em função de dimensões laterais, energia de ligação de excitons e impurezas hidrogênicas serão discutidos.

[1] P.M. Petroff, A.C. Gossard, R.A. Logan and W.Wiegmann, Phys.Lett.41,635(1982)

[2] A.B. Fowler, A. Hartstein and R.A. Webb, Phys.Rev.Lett. 48 196 (1982).

**SEM/PAJNEL ESTADOS ELETRÔNICOS AUTOCONSISTENTES EM POÇOS QUÂNTICOS COM DOPAGEM SELETIVA E EM PRESENÇA DE CAMPO ELÉTRICO EXTERNO. Gilmar Eugênio Marques e Paulo Daniel Esmel. (Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos).**

Estudos de absorção óptica em hetero-estruturas semicondutoras apresentam grande variedade de situações físicas extremamente interessantes mas de difícil interpretação devido à diferentes contribuições tais como efeitos de muitos corpos, campos elétricos intrínsecos devidos à impurezas, não parabolicidade das bandas, temperatura etc. De certa forma, efeitos de muitos corpos e campos elétricos intrínsecos estão sempre juntos, pois os primeiros dependem da densidade eletrônica que é fortemente influenciada pelos segundos. Com dopagem seletiva é possível se criar uma situação onde a aplicação de um campo elétrico externo pode ser usada para se compensar o efeito de campos intrínsecos e assim se determinar a contribuição dos efeitos de muitos corpos apenas. Calcula-se autoconsistentemente a estrutura eletrônica em hetero-estruturas dopadas seletivamente de um dos lados e sob ação de um campo elétrico externo, aplicado perpendicularmente às interfaces do sistema. Desta forma, pode-se determinar as diversas contribuições à absorção óptica, renormalização dos Gaps efetivos de energia, etc.

**SEM/PAINEL** "CARACTERIZAÇÃO DE  $Ga_{1-x}Al_xAs$  CRESCIDOS POR MOCVD A PRESSÃO ATMOSFERICA". \*Ayrton André Bernussi, +Aldionso Marques Machado e \*Paulo Motisuke

São apresentados neste trabalho, espectros fotoluminescência a 300 K e 2 K de filmes de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  não dopados. Observamos, à temperatura ambiente, a existência de duas transições em várias das amostras analisadas. Esta separação das bandas, pode estar relacionada com a existência de duas composições na liga ou, com a contaminação por impurezas com energias de ligação que variam com a composição de Al. Os espectros obtidos a 2 K para algumas destas amostras, indicaram que a impureza residual predominante é o carbono.

\* IFGW - UNICAMP

+ CPqD - Telebras

**SEM/PAINEL** PROPRIEDADES ÓPTICAS DE LIGAS DE SILÍCIO-NITROGÊNIO PREPARADAS POR SPUTTERING RF. J.H. Dias da Silva, J.L. Cisneros, M.F. Gantão e F.C. Marques. Instituto de Física - Unicamp - CP 6165 - 13081 Campinas, SP.

Filmes finos da liga Silício-Nitrogênio com concentração variável de nitrogênio foram depositadas pelo método "Sputtering RF". Foi usado um alvo de Silício puro numa atmosfera de  $Ar+N_2+H_2$ . Por meio de medidas de transmissão óptica foram determinados o índice de refração e o coeficiente de absorção em função da energia da radiação incidente. O gap óptico foi calculado usando a teoria de Tauc. Foram também medidos os espectros de transmissão na região do infravermelho os quais mostram as bandas de absorção correspondentes à vibração das ligações (Si-H), (Si-N) e (N-H).

Foi observada uma grande variação de  $E_g$  e dos números das ligações (Si-H) e (N-H). para um valor crítico da razão das pressões  $P_{N_2}/P_{tot}$ .

**SEM/PAINEL** TÍTULO: "Estrutura Eletrônica em Poços Quânticos de Semicondutores de 'Gap-Zero'. (HgTe, HgSe)

Sebastião Rocha A. Neto, Gilmar Eugênio Marques  
Deptº de Física - Univ. Federal de São Carlos - SP

A região de comprimento de onda menor que 6 microns não é coberta por nenhum semicondutor simples ou composto.

Certas ligas de semicondutores possuem um gap longo e suficiente para cobrir esta região, com a vantagem adicional de que este gap é função da concentração, o que permite uma escolha da faixa de trabalho do dispositivo.

Estamos estudando a estrutura eletrônica em poços quânticos de  $Hg_{1-x}Cd_xTe - Hg_{1-x}Cd_xSe$  como função da concentração, em torno da transição semicondutor-semimetal.

SEM/PAINEL

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE AGREGADO CRYSTALINO AO CÁLCULO DE DEFETOS EM CRIATIS IÓNICOS. Paulo S. Guimarães, NCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, CP: 515, 12201 - São José dos Campos, SP, Brasil; e Manoel L. Siqueira, Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil.

O método de agregado cristalino é um método de primeiros princípios desenvolvido para o estudo das propriedades eletrônicas de cristais por meio de agregados moleculares. Para tanto impõem-se ao agregado condição de contorno cristalinos adequados. No caso do estudo de defeitos em cristais ele tem, entre outras, a vantagem de definir um referencial de energia único tanto para o agregado que representa o cristal quanto para aquele que simula o defeito no cristal. Neste trabalho utilizamos o método de agregado cristalino, dentro do formalismo de espliamento múltiplo, para estudar alguns defeitos importantes no cloreto de sódio.

SEM/PAINEL

CARACTERIZAÇÃO POR AES E SIMS DE FILMES DE TiN E SiN PRODUZIDOS POR "SPUTTERING" REATIVO. Carlos Achete, Andre Zana (LEMI/PEM/COPPE/UFRJ).

Os nitretos de titânio e silício são caracterizados por possuirem: estabilidade química, boas propriedades dielettricas e alta dureza. Por isto, tem sido cada vez maior o interesse no desenvolvimento de novas técnicas para produção de filmes finos destes materiais. Filmes finos destes nitretos tem sido aplicados tanto na indústria microeletrônica (por ex. SiN como camada isolante), como na indústria mecânica (por ex. TiN como camada dura para reduzir o desgaste de ferramentas).

Neste trabalho são apresentados os resultados da caracterização com espectroscopia de elétrons Auger (AES) e espectrometria de massa de íons secundários (SIMS) de filmes finos de TiN e SiN. Os filmes foram depositados por "sputtering" reativo em atmosfera de argônio e nitrogênio. É comum se observar, nos filmes produzidos por este método, uma determinada contaminação por impurezas como oxigênio e carbono. O nosso principal objetivo é investigar a influência destes contaminantes nas propriedades dos nitretos.

SEM/PAINEL

"ESTUDO DA DIFUSÃO DE Zn EM InGaAs (In 53% e Ga 47%) - E.A.S.Sato,  
P.J. Shieh - CPqD-TELEBRAS - Campinas.

Nosso objetivo é estudar a variação dos parâmetros da difusão de Zn em InGaAs, e utilizá-lo posteriormente para criar uma região p, para fabricação de fotodetectores do tipo PIN.

Utilizamos em nossos estudos cristais de InGaAs crescidos por epitaxia da fase líquida(LPE), com concentração residual da ordem de  $10^{15}$  portadores/cm<sup>3</sup>.

Determinamos a variação da profundidade da junção com o tempo e com a temperatura de difusão.

Através das medidas de CV eletrolítico foi levantado o perfil dos portadores da difusão. Observamos um comportamento abrupto da junção, o que justifica o uso deste tipo de processo na fabricação de detectores de InGaAs.

Como complementação do trabalho estudaremos o comportamento dessa junção abrupta com um tratamento térmico, simulando o processo de fabricação do detector.

Tentaremos ainda medir a solubilidade sólida do Zn em InGaAs.

**SEM/PAINEL**

**BANDEA DE ENTRUNHAS EM SILICONUTRIOS DE 'CAF' INDIRETO**

Marcos Senna Figueiru - UFF; Sergio Saul Walker - UFF;  
Enrique Victoriano Andrade - UFF.

Neste trabalho são estudados os semicondutores dopados do 'gap' indireto, para concentrações de impurezas que variam até a concentração crítica, onde ocorre a transição metal-isolante. O Módulo é descrito por um Hamiltoniano para duas bandas hibridizadas numa base de funções de onda de Kohn e Luttinger que levam em conta a estrutura de muitos valos das bandas da matriz hospedadora. O Hamiltoniano é resolvido na Aproximação CFA pela técnica das Funções de Green. A discordância é tratada na Aproximação de Matsumura e Toyozawa. As correlações não locais são incluídas no Módulo através de um cálculo que leva em conta a dependência do constante dielétrica estética com o vetor de onda. É feita uma aplicação para o Si:P.

**SEM/PAINEL**

**"FABRICAÇÃO DE DIODOS LASERS EM  $\lambda=1.3\mu m$  USANDO EPITAXIA DE FASE LÍQUIDA". - José Roberto Caumo e Wilson Carvalho Jr. - CPqD-TELEBRÁS - 13.085 - Campinas - SP.**

Diodos lasers com emissão em  $\lambda=1.3\mu m$  usando a liga quaternária InGaAsP são bastante utilizados em comunicação óptica. Apresentaremos resultados do desenvolvimento e fabricação dos dispositivos utilizando epitaxia de fase líquida para o crescimento das camadas. Resultados de caracterização do material crescido, bem como dos dispositivos fabricados serão discutidos.

**SEM/PAINEL**

**"CARACTERIZAÇÃO DE CAMADAS DE InGaAsP POR CATODOLUMINESCÊNCIA ESPECTRAL". - Ricardo Benetton Martins e Wilson Carvalho Jr. - CPqD-TELEBRÁS - 13.085 - Campinas - SP.**

O uso da catodoluminescência com resolução espectral associada ao microscópio eletrônico de varredura na caracterização de compostos do sistema quaternário InGaAsP é recente e vem apresentando resultados úteis para uma melhor avaliação das técnicas de crescimento e das características intrínsecas do material.

Neste trabalho apresentaremos resultados iniciais na caracterização de camadas de material quaternário crescidos por epitaxia de fase líquida.

**SEM/PAINEL** "TEMPERATURA DE PORTADORES NA ELETROLUMINESCÊNCIA DE HETEROESTRUTURAS DE GaAs/GaAlAs". - Felipe Rudge Barbosa - CPqD-TELEBRÁS, 13.085-Campinas,SP.

Pela análise dos espectros de eletroluminescência de diodos emissores de luz, pode-se obter informação sobre a dependência funcional da distribuição de portadores na banda de condução, e a temperatura da amostra. Efeitos de reabsorção da radiação na região ativa modificam essa distribuição, alternando assim o valor calculado da temperatura. Apresentamos nesse trabalho a discussão de dados experimentais obtidos à temperatura ambiente, para várias amostras e diferentes densidades de corrente injetada. Objetivamos esclarecer os mecanismos que contribuem para explicação dos resultados obtidos.

**SEM/PAINEL** LASER DE HETEROESTRUTURA DE CONFINAMENTO SEPARADO EM InP/InGaAsP. S.Wainhertz e F.C. de Prince, IFGW-Unicamp, Campinas-SP

A heteroestrutura de confinamento separado é um modificaçāo do laser semicondutor de heteroestrutura dupla convencional, em que a região ativa não crescente das duas camadas adjacentes transparentes à radiação e de banda proibida maior do que a região ativa. Assim, os portadores são confinados na região ativa, onde deve ocorrer a recombinação, e a radiação é confinada na região ativa e nas duas camadas adjacentes (guia de onda de cinco camadas). O efeito disto é um aumento do confinamento óptico (fração de radiação presente na região ativa) e uma consequente diminuição de corrente limiar.

Aqui são apresentados resultados preliminares de cálculos do confinamento óptico  $\Gamma$  e de corrente limiar  $J_L$ , para lasers de InP/InGaAsP emitindo em  $1.3\mu m$ , em função das espessuras da região ativa e das camadas confinantes.

(CNPq/Telebrás)

**SEM/PAINEL** CÁLCULO DE GANHO EM LASER DE "QUANTUM WELL" : H.C.Frateschi e N.B.Patel - DFA-IFGW-UNICAMP- Campinas-SP

Desenvolve-se um processo numérico de obtenção do ganho limiar em função da densidade de corrente injetada em lasers de "quantum well" de GaAs-GaAlAs.

Neste cálculo pretende-se obter a dependência de características de operação do dispositivo em certos parâmetros estruturais do laser, tais como: espessura da camada ativa e número de possos quānticos.

SEM/PAINEL

MEDIDAS DE INTERDIFUSÃO DE In EM HETEROESTRUTURAS DE  $In_x Ga_{1-x} As/GaAs$  - Fernando Iikawa, Paulo Motisuke - UNICAMP e M.A.Sacilotti - CPqD - Telebrás.

Medidas de fotoluminescência e absorção a 2K em super-redes de  $In_x Ga_{1-x} As/GaAs$  obtidas antes e depois dos tratamentos térmicos mostraram deslocamentos dos picos correspondentes a recombinações dos elétrons e buracos com  $n = 1$ . A partir dos dados experimentais e de um modelo de interdifusão determinamos o coeficiente da interdifusão do In e Ga.

SEM/PAINEL

"CARACTERIZAÇÃO DOS LASERS DE TRÊS E CINCO CAMADAS ATRAVÉS DA CORRENTE INDUZIDA POR FEIXE ELETRÔNICO". - R.B.Martins e E.Conforto - CPqD-TELEBRÁS - Campinas-SP.

A qualidade e confiabilidade dos lasers semicondutores, em particular os dispositivos à base de compostos III-V, vem sendo exaustivamente analisada em nossos laboratórios fazendo-se uso de várias técnicas de caracterização. O nosso trabalho está baseado em uma destas técnicas: a corrente induzida por feixe eletrônico (conhecida internacionalmente como EBIC), a qual é associada ao microscópio eletrônico de varredura (MEV).

Os alvos de nossas análises foram duas estruturas utilizadas na fabricação de lasers semicondutores à base de GaAlAs/GaAs: o laser de três camadas com contato de faixa e o laser de cinco camadas com contato em "v". Várias amostras foram caracterizadas através da técnica de EBIC e os resultados obtidos tem sido bastante úteis para uma boa avaliação da qualidade do dispositivo final. Neste trabalho mostraremos um resumo destas observações, bem como discutiremos alguns resultados ainda pouco compreendidos que necessitam de estudos mais complexos.

SEM/PAINEL

"FATORES ESTRUTURAIS ASSOCIADOS À RESISTÊNCIA SÉRIE NUM LASER DE HETEROESTRUTURA DUPLA GaAs/GaAlAs". - E.Conforto e R.B.Martins - CPqD-TELEBRÁS - Campinas-SP.

A resistência série ( $R_s$ ) é um parâmetro de suma importância em dispositivos optoeletrônicos e a sua influência sobre o funcionamento e confiabilidade desses dispositivos tem sido objeto de muitos trabalhos de pesquisa. Particularmente interessantes para esse estudo são os lasers semicondutores de heteroestrutura dupla de GaAs/GaAlAs crescidos por epitaxia de fase líquida com 5 camadas e contato em "V". Nesse dispositivo vários fatores podem influenciar o valor de  $R_s$ , notadamente fatores inerentes a estrutura geométrica do cristal.

Dispondo de um microscópio eletrônico de varredura utilizado na modalidade de elétrons secundários e preparando as amostras através de ataque químico seletivo para as várias camadas, analisamos vários lasers e observamos uma correlação entre o valor medida para  $R_s$  e a distância entre a frente de difusão de Zn e a camada ativa do laser (2a. camada).

**SEM/PAINEL** COMPARAÇÃO ENTRE AS TÉCNICAS DE CATODOLUMINESCÊNCIA E CORRENTE INDUZIDA POR FEIXE ELETRÔNICO. Ricardo Benetton Martins e C.A.Ribeiro - Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física-LPD.

O estudo dos dispositivos semicondutores por meio de técnicas não destrutivas é de grande interesse, a catodoluminescência (CL) e a corrente induzida por feixe eletrônico (EBIC) são dois métodos de grande potencial neste aspecto, no qual o estudo de defeitos cristalinos tem particular interesse para o desenvolvimento de dispositivos epitaxiais.

Apresentamos neste trabalho uma comparação entre estas duas técnicas que têm princípios comuns, mas que têm características particulares, aplicadas a um laser de heteroestrutura dupla da GaAs/GaAlAs.

**SEM/PAINEL** CARACTERIZAÇÃO DE COMPOSTOS III-V PARA DISPOSITIVOS OPTOELETRÔNICOS. - Mario T.Furtado, Maria S.S. Loural, Antonio C.Sachs e Wilson Carvalho Jr. - CPqD-TELEBRÁS.

São apresentadas medidas de fotoluminescência e CV eletroquímico em camadas semicondutoras de compostos III-V crescidas por epitaxia em fase líquida. Camadas de heteroestrutura dupla de GaAlAs e InGaAsP/InP, bem como monocamadas de GaAlAs, InGaAs e InP foram investigadas. A análise por fotoluminescência também inclui o estudo de regiões não radiativas que dependem da potência de excitação. Os perfis de dopagem medidos por CV eletroquímico são homogêneos e estão correlacionados com os espectros de fotoluminescência. Além disso, o comprimento de difusão de portadores minoritários em GaAlAs de tipo p foi estimado, e o espectro de absorção de GaAlAs foi calculado via o formalismo do balanço detalhado.

**SEM/PAINEL** PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO COMPLEXO FERRO-BORO EM SILÍCIO. Lucy V.C. Assadi e José Roberto Leite (Instituto de Física da Universidade de São Paulo)

Calculamos a estrutura eletrônica do complexo ferro intersticial-boro substitucional em silício utilizando o modelo do aglomerado molecular dentro do formalismo do método do espalhamento múltiplo  $X\alpha$ , com tratamento dos orbitais de superfície através da esfera de Watson.

Adotamos um aglomerado que consiste em um átomo central de Fe na posição intersticial tetraédrica, um átomo de B substitucional primeiro vizinho ao Fe e mais oito camadas de Si classificados de acordo com a simetria  $C_{3v}$  do aglomerado.

Nossos resultados mostram que o modelo microscópico apropriado para descrever o par é covalente em contraste com o modelo iônico usualmente aceito. Assim, a formação dos estados de impureza podem ser descritos a partir dos orbitais moleculares das impurezas isoladas. Nossos resultados são comparados com as evidências experimentais de EPR obtidas para o complexo Fe-B com simetria axial na direção  $\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ .

SEM/PAINEL

## CÁLCULO DA ESTRUTURA DE BANDAS E PROPRIEDADES RELACIONADAS

D.F. de Mello e G.E. Barberis

Unicamp, 13100, Campinas, S.P.

Calculamos as bandas de 19 semicondutores com estrutura zincblenda usando o método empírico Tight-binding numa base mínima  $sp^2s'$  (1), (onde  $s'$  é um pseudo-estado excitado) e também usando o método ab-initio ASW com aproximação linear relativística e de esferas variáveis (2) e (3).

Obtivemos em ambos os métodos as densidades de estado parciais e totais. Estamos agora calculando a densidade de carga, a constante dieletrica e a refletividade. Para o método Tight-binding estamos usando orbitais atómicos.

Comparamos os resultados obtidos entre os dois métodos e também com resultados da literatura obtidos pelo método empírico de pseudopotenciais.

### Bibliografia

1. Vogl and Dow - J.Phys.Chem.Solids.vol.44, nº5,365, (1983)

2.Williams, Kubler, Gelatt - Phys.Rev.B19, 6094 (1975)

3.Rompa et al - Phys.Rev.Letters 52, 675 (1984)

SEM/PAINEL

## FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE ARRANJOS DE DETETORES DE Pb<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub>Te. E. Abramof,

S.O.Ferreira, C. Boschetti, S.P. da Cunha, I.N. Bandeira. MCT/Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, CP: 515, 12201 - São José dos Campos, SP, Brasil.

Arranjos de detetores são fabricados através da técnica HME ("Hot Wall Epitaxy"). As camadas, com espessura de ~2 μm e concentração de portadores  $n = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , são crescidas em um substrato de PbTe do tipo p( $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ). Estuda-se a homogeneidade dos arranjos medindo-se as detectividades, respostas espectrais e tempos de respostas de cada detector a 77K.

SEM/PAINEL

## ESTRUTURA ELETRÔNICA DE CRISTAIS ATRAVÉS DE MÉTODOS MOLECULARES:

W.V.M.Machado, O.L.Kinoshita, M.L.de Siqueira, L.G.Ferreira.

Tanto o Método Celular Variacional (MCV) quanto o Método do Espalhamento Multiplo (MS) podem ser associados à técnica dos agregados (clusters) cristalinos criando uma ferramenta importante com a qual se consegue reproduzir as principais características da estrutura eletrônica de um cristal infinito. Em ambos os casos a equação de Schrödinger é resolvida no agregado molecular para os vários estados ocupados e a densidade eletrônica, esfericamente simétrica, dos átomos representativos de cada espécie, transferida para o cristal e repetida na rede infinita. Na região interesférica a densidade de carga será aquela que neutraliza a carga da esfera. A equação de Poisson é então resolvida no cristal e o potencial resultante colocado em um formato muffin-tin e transferido novamente para o agregado.

Cálculos realizados com o óxido e o seleneto de zinco (do grupo II-VI) evidenciam que a abordagem através do MCV cristalino se mostra eficiente desde que o nível 3d do zinco esteja suficientemente espaçado do p do topo da banda de valência (ex.ZnSe) No caso de pequena separação entre os referidos níveis, o MS é mais vantajoso.

**SEM/PAINEL**

**PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE TELLURETO DE CADMIO (CdTe),**

**Carlos Luiz Ferreira, Instituto Militar de Engenharia.**

Filmes finos de Tellureto de Cádmio são produzidos através do aquecimento dos grãos de CdTe pela passagem de uma corrente elétrica por uma barquinha de molibdênio. Após a dissociação do material, é realizada a ionização dos átomos de Cádmio e Tellúrio, através de um feixe de elétrons, e os íons são acelerados para o substrato. Os filmes produzidos são caracterizados quanto a morfologia através de observações no microscópio eletrônico de varredura e pela técnica de difração de raio-X. A caracterização elétrica é realizada através de medidas de efeito Hall, enquanto a caracterização ótica é obtida através de medidas de absorção ótica. Estudos mais detalhados da composição, parâmetros ópticos e fotoelétricos, serão realizados no Solar Energy Research Institute (SERI) através de um programa de colaboração.

**SEM/PAINEL**

**ANALISE DA INTERFACE ITO/a-Si:H . Agenor Madruga, Carlos Gatti, Sérgio Carvalho Jr., Wolfgang Lorch (LEMI/PEMM/COPPE/UFRJ).**

Heterojunções do tipo Silício Amorfo Hidrogenado (a-Si:H)/Óxido de Índio e Estanho (ITO) são muito utilizadas em células solares de a-Si:H. O estudo da interdifusão nestas heterojunções é importante devido ao interesse em otimizar a eficiência destas células. Neste trabalho, a interface entre estas camadas é estudada por Espectroscopia de Eletrons Auger.

Através de perfis de profundidade e análise da forma dos picos Auger, estudam-se os processos de interdifusão que ocorrem nesta interface quando os filmes são submetidos a tratamentos térmicos em vácuo. É também analisada a influência da dopagem do a-Si:H, bem como de uma camada de Óxido de Silício depositada na interface, sobre estes processos.

**SEM/PAINEL**

**TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS SOB PRESSÃO: SEMICONDUTORES TIPO ZINCOLENDRA E HEXAGONAL "CLOSE PACKED". Sandra F. Carrara e Gaston E. Barberis- Instituto de Física, UNICAMP.**

Usando o método de ondas esféricas aumentadas! (ASW) são calculadas as transições de fase dos compostos CdS, CdSe e CdTe sob pressão. O cálculo de energia total permite obter, além das bandas e densidades de estado, os parâmetros de rede, os módulos elásticos e os caloros de formação desses compostos para cada uma de suas fases. São apresentadas as mudanças nas propriedades elétricas como funções de pressão. Os resultados obtidos são comparados com os dados experimentais existentes.

1. A.R. Williams, J. Kuehler and C.D. Gelatt,Jr. Phys. Rev. B 19, 6094 (1979)