



XVII

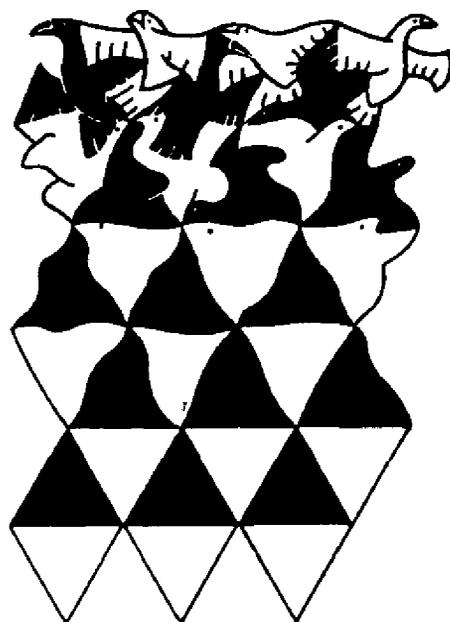
**Encontro Nacional de
FÍSICA DA MATÉRIA
CONDENSADA**

Caxambu, 7 a 11 de junho de 1994.



Resumos

XVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada



Resumos

530.406	Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 17,
E56f	Caxambu, 1994
17	Física da Matéria Condensada: resumos, São Paulo, S.B.F., 1994
	427 p.
	1. Física da Matéria Condensada - Congressos; I. Título

Índice

Resumos.....	3
Física Atômica e Molecular (ATO).....	5
Biofísica (BIO).....	35
Crescimento, Caracterização e Propriedades dos Materiais (CCP).....	59
Cristalografia (CRI).....	85
Física Estatística e Fenômenos Críticos (EST).....	98
Instrumentação (INS).....	146
Cristais Líquidos (LIQ).....	165
Ciência dos Materiais (MAT).....	177
Metais e Materiais Magnéticos (MMM).....	205
Ótica (OTI).....	239
Polímeros (POL).....	267
Ressonância Magnética (RES).....	283
Semicondutores (SEM).....	300
Supercondutividade (SUC).....	347
Superfícies e Filmes Finos (SUF).....	363
Palestras Vespertinas.....	386
Índice de Autores e Apresentações.....	393

FÍSICA ATÔMICA E MOLECULAR

Física Atômica e Molecular: Teoria (ATO) - 08/06/94

ESTUDO TEÓRICO DA GEOMETRIA PIRAMIDAL DO TIOFENO COORDENADO AO FRAGMENTO $[\text{Cp}(\text{CO})_2\text{Fe}]^+$

RINCÓN, L.

Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas

TERRA, J.; GUENZBURGER, D.

CBPF/CNPq

SANCHEZ-DELGADO, R.

IVIC

Cálculos na teoria do funcional da densidade foram realizados para investigar a coordenação piramidal do enxofre no complexo de tiofeno $\text{C}_4 - [\text{Cp}(\text{CO})_2\text{Fe}(\text{T})]^+$ (Cp=ciclopentadieno, T=tiofeno). O método utilizado foi o Variacional Discreto com potencial auto-consistente, empregando-se uma base de orbitais atômicos numéricos. Todos os elétrons foram considerados variacionalmente ativos. Cálculos de energia total foram realizados para se determinar o valor de equilíbrio do ângulo entre a ligação Fe-S e o plano do tiofeno; êste foi determinado como sendo 120° . Uma análise das mudanças nos orbitais causadas pela variação angular revelou que o mecanismo responsável pela coordenação é a redução da interação antiligante entre o orbital ocupado $d(\pi)$ e o par de elétrons desemparelhado π canônico do S do tiofeno livre. O mecanismo encontrado é consistente com a ideia de re-hibridização sp^3 do átomo de S do tiofeno. Cálculos executados com e sem inclusão do orbital 3d na base do S mostram o mesmo mecanismo para a coordenação piramidal.

FOG E FOO PARA EXCITAÇÕES DE VALÊNCIA E CAMADA INTERNA DO Mg

MARTINS, L. M. M. A.; BIELSCHOWSKY, C.

IQ-UFRJ

Determinamos valores teóricos para as Energias de Excitação, Força de Oscilador Ótica (no caso de processos permitidos por regra de seleção de dipolo elétrico) e Força de Oscilador Generalizada de diversos processos de excitação de elétrons de valência e camadas internas do átomo de Magnésio. Consideramos excitações de valência $3s^2 \rightarrow 3sns$; $3s^2 \rightarrow 3snp$ e $3s^2 \rightarrow 3s3d$, como as séries referentes à processos de excitações de elétrons de camada internas $2p^2 \rightarrow 2pns$, $2p^2 \rightarrow 2pnp$; $2s^2 \rightarrow 2sns$;

$2s^2 \rightarrow 2snp$; $1s^2 \rightarrow 1sns$ e $1s^2 \rightarrow 1snp$. Utilizamos funções de onda atômicas determinadas em cálculos "Ab-Initio" seguido de Interação de Configurações otimizadas de forma independente para cada um dos estados envolvidos. Desta forma, os efeitos de correlação e relaxamento são considerados adequadamente nos cálculos. Os cálculos da Força de Oscilador Generalizada foram realizadas no contexto da Primeira Aproximação de Born, sendo utilizado o método de biortogonalização para calcular elementos de matriz entre os estados fundamental e excitado, que por terem sido otimizados independentemente são ortogonais. Os resultados obtidos são comparados com resultados experimentais e teóricos disponíveis.

1 - C. E. Bielschowsky, M. A. C. Nascimento e E. Hollauer, Phys. Rev. A 45, 7942(1992),

2 - M. P. Miranda e C. E. Bielschowsky, Journal of Molecular Structure (Theochem) 282, 71(1993).

UM MÉTODO CI NÃO ORTOGONAL USANDO MULTIPLAS SOLUÇÕES HARTREE-FOCK

MAKIUCHI, N.; WERNECK, A. S.; DARDENNE, L. E.; VIANNA, J. D. M.

Universidade de Brasília - UnB

MOREIRA SOBRINHO, A. C.; MALBOUSSON, L. A. C.

Universidade Federal da Bahia - UFBA

Alternativamente ao método usual(SCF)desenvolveu-se em nosso grupo o Método Algébrico(MA). Por esse método as equações HF são transformadas em um sistema de equações algébricas não lineares. Conseqüentemente o MA permite determinar, em princípio, todos os diferentes pontos de extremo(máximos, mínimos e de sela) do funcional Hartree-Fock. As soluções assim obtidas constituem uma base não ortogonal para o espaço de Hilbert.

Neste trabalho nós utilizamos esta base para o desenvolvimento de um cálculo CI-não ortogonal. Aplicamos o método a sistemas diatômicos ($\text{Li}_2, \text{LiH}, \text{BH}, \text{F}_2, \text{CO}$) com diferentes bases e comparamos os resultados com o CI-usual, ortogonal, quanto ao número de configurações utilizadas e os valores de energia obtidos.

Analizando o número de configurações usadas em cada cálculo, nossos resultados com a nova base mostram-se, em geral melhores que aqueles obtidos com o CI ortogonal com base truncada. Para a energia total para o LiH , nosso resultado com 20 configurações difere do

CI-completo com 41 configurações por uma quantidade menor que 7×10^{-6} Hartrees e para o Li_2 nosso resultado com 21 configurações difere do CI-completo com 92 Configurações por uma quantidade menor que 6×10^{-5} Hartrees.

A MOLECULAR APPROACH FOR THE BOUND STATES OF ABA COULOMB SYSTEMS FROM H_2^+ TO Ps^-

MOHALLEM, J. R.
UFMG

A new approach is introduced for adiabatic and nonadiabatic calculations in the ABA Coulomb systems from H_2^+ to the positronium negative ion $Ps^- (e^- e^+ e^-)$, so that they are treated as molecular systems. The adiabatic vibrational solutions point out the most relevant "nuclear" configurations that should appear in the construction of the nonadiabatic wavefunction and reveal the importance of the AA vibrations at this stage. Applications provide evidences of the separability of the ground state of Ps^- and give energy values for six S bound states of $\mu^+ e^- \mu^+$ that seem not reported so far. The possibility of obtaining a more general separable function, in the range from the atomic to the molecular case is being studied.

Electronic Properties of Carbon Nanotubes.

MACEDO, T. C. A.; ANDREATA, M. W.; LIMA, G. A. R.

UNESP faculdade de Engenharia de Guaratinguetá
Departamento de Física e Química
KINTOP, J. A.
Instituto de Física da Universidade de Sao Paulo

In this work we used two semiempirical approach PM3 (Parametric Method Number 3) and INDO (Intermediated Neglect of Differential Overlap) capable of calculating configuration Interaction (CI), to study the effect on bond angle and bond length on the geometric and electronic and optical properties of carbon clusters microtube. Calculation performed on large clusters representing such structure are capable of producing accurated information about geometry and its implication on the electronic structure of this material. The full geometry optimization of bond length and bond angle predicts that the optimal values for these parameters are C-C=1.415 Å and the bond angle α, β and γ tend to have the same values in favor of relaxed structure. Our results shown that the electronic conduction depends on the diameter of the microtube as well as its helical fashion and require experimental measurement wich will be extremely helpful in clarifying how angles act to stabilize the carbon microtube during the growth process.

DETERMINAÇÃO DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO ENTRE PARES A PARTIR DE FUNÇÃO DE ONDA CORRELACIONADA

PEDROZA, A. C.
UNB

Na Teoria do Funcional da Densidade (TFD) a Energia de Troca-e-Correção pode ser obtida quando se conhece a Função de Correção entre Pares integrada na constante de acoplamento, i.é, $\tilde{g} = \int_0^1 g_\lambda(\vec{r}, \vec{r}'; n) d\lambda$, onde g_λ é a Função de Correção entre Pares para um sistema sujeito a uma interação do tipo $v(\vec{r}) = \lambda/r$. Neste trabalho nós procuramos determinar \tilde{g} para sistemas onde a densidade eletrônica $n(\vec{r})$ é conhecida a partir de função de onda correlacionada altamente acurada obtida de cálculos tipo CI ou Hylleraas. O conhecimento da "exata" função \tilde{g} possibilita uma análise da qualidade das diferentes aproximações comumente utilizadas na TFD e pode, também, servir de base para a construção de aproximações n ao-locais como, por exemplo, dentro da abordagem de aproximação com pesos na densidade. Igualmente, pode-se checar se a função \tilde{g} assim obtida obedece as condições exigidas para uma correta Função de Correção entre Pares.

Física Atômica e Molecular I (ATO) -
08/06/94

HEAT CONDUCTION THROUGH A RAREFIED GAS BETWEEN TWO ROTATING CYLINDERS

SHARIPOV, F.
UFPR

The heat conduction through a gas confined between two cylinders having different temperatures is a classical problem of rarefied gas dynamics. In the present work an influence of rotation on the heat flux is investigated. From kinetic point of view one can conclude that the rotation changes the heat flux because the distribution function modifies in rotating systems. But the picture changes not only quantitatively but qualitatively too. It was predicted an existence of tangential heat flux caused by a radial temperature gradient in rotating systems. The aim of the present work is to calculate the heat flow field in the case of small temperature difference and to show that the tangential heat flux arises in rotating systems. A preliminary analysis of numerical results shows that the tangential heat

flux is significant in a rarefied gas when the rotation frequency has the order of the intermolecular collision frequency. In the report the profile of the gas density, temperature, bulk velocity and tangential heat flux will be presented.

CÁLCULOS RELATIVÍSTICOS E NÃO-RELATIVÍSTICOS PARA OS COMPLEXOS $[M(CN)_5]^{3-}$ (M=Co, Rh, Ir)

NOGUEIRA, S. R.

UFRJ

GUENZBURGER, D.

CBPF/CNPq

Cálculos auto-consistentes na teoria do funcional da densidade foram realizados para se obter a estrutura eletrônica dos complexos paramagnéticos $[Co(CN)_5]^{3-}$, $[Rh(CN)_5]^{3-}$ e $[Ir(CN)_5]^{3-}$ de simetria tetra-piramidal. O método utilizado foi o numérico Variacional Discreto. Foram determinadas as distribuições de carga eletrônica e de spin sobre os átomos dos complexos. Foi determinado que o elétron desemparelhado no orbital HOMO (mais alto ocupado) é consideravelmente delocalizado pelos ligantes, e que o grau de delocalização aumenta na ordem $Co < Rh < Ir$. O desdobramento dos níveis de "campo cristalino" é bastante maior para os complexos de Rh e Ir, comparados ao complexo de Co. Foram calculados gradientes de campo elétrico e parâmetros hiperfinos magnéticos no sítio do metal, e os resultados foram comparados com valores experimentais reportados, obtidos por medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica em matrizes sólidas. Cálculos plenamente relativísticos para $[Ir(CN)_5]^{3-}$ revelaram a importância dos efeitos relativísticos no fortalecimento da ligação covalente Ir-CN.

ATOMS IN CARBON NANOTUBES

LAPÉR, F. V.; CHACHAM, H.

UFMG

We perform electronic structure calculations for carbon nanotubes interacting with different kinds of atoms. The calculations are performed within the extend Hückel formalism. We use a cluster model for the nanotubes in which the dangling bonds at the tube edges are saturated by hydrogen atoms. We test the model for clusters up to 78 atoms, checking for the convergence of electronic and structural properties as a function of the size and shape of the clusters. The model is tested for graphite sheets as well as for tubes of different sizes. In the study, we search for chemical trends for atoms nearby and inside the tubes.

STRUCTURAL AND ELECTRONIC STUDIES OF Ga_3As_3 , Ga_4As_3 and Ga_3As_4

PIQUINI, P.; FAZZIO, A.; CANUTO, S.

USP

Ab-initio self-consistent-field calculations are performed on Ga_3As_3 , Ga_4As_3 and Ga_3As_4 clusters. Geometries, electron affinities, ionization potentials and bondings are analyzed for these clusters. Geometry optimizations using analytic energy gradients followed by single point MP2 calculations are performed to decide for the equilibrium structure. The vibrational frequencies are analysed for all the geometries obtained in the minimization procedure. It's observed that the Ga-As binding is increased (decreased) when one introduces (remove) an electron from the neutral system. The introduction (removal) of an electron also increases (decreases) the promotion of electron from the *s* to the *p* atomic orbitals of the atoms in the clusters. The experimentally observed alternation pattern in the ionization potential and electron affinity for Ga_mAs_n clusters with $m+n \leq 20$ are suggested to be obtained only after correlation energy is included. Our results are compared with previous theoretical and experimental calculations.

VARIATIONAL CALCULATIONS FOR THE BOUND-UNBOUND TRANSITION OF THE YUKAWA POTENTIAL

GOMES, O. A.; CHACHAM, H.; MOHALLEM, J. R.

UFMG

We perform LCAO (linear combination of molecular orbitals) calculations for the ground state of the Yukawa potential $V(r) = -\frac{e^2}{r} e^{-qr}$ as a function of the screening parameter *q*. We obtain the best variational result so far for the ground-state energy E_0 as a function of *q*. We also obtain the critical exponents of both the probability density at the origin and the ground-state energy as functions of $(q - q_c)$, where q_c is the critical *q* above which $V(r)$ does not have a bound state. The use of the critical exponents permits the so far most precise determination of q_c , $q_c = 1.19061227 \pm 0.00000004$. We also show that it is possible to use the LCAO calculations as a tool to determine the analytical form of very precise variational wavefunctions.

Funções de Base para uso em Cálculos Moleculares com Pseudopotenciais

BETTEGA, M. H. F.

Universidade Federal do Paraná

POLICASTRO, A. P.; LIMA, M. A. P.; FERREIRA, L.

G.

Universidade Estadual de Campinas

Funções Gaussianas Cartesianas

$$(\chi_{lmn}^{\alpha, \vec{a}} = N_{lmn} (x-a_x)^l (y-a_y)^m (z-a_z)^n \exp(-\alpha |\vec{r} - \vec{a}|^2))$$

são muito utilizadas em cálculos de estrutura eletrônica e de espalhamento envolvendo moléculas, pois permitem que os elementos de matriz do Hamiltoniano sejam calculados de forma fechada. Existe uma vasta literatura sobre estas funções, onde podem ser encontradas tabelas de expoentes e coeficientes (veja, por exemplo, R. Poirier, R. Kari, I. G. Csizmadia, "Handbook of Gaussian Basis Sets" (Elsevier, New York, 1985), Physical Sciences Data, vol. 24). Cálculos *ab initio* de espalhamento de elétrons por moléculas são computacionalmente caros, e o estudo de espalhamento envolvendo sistemas com muitos elétrons torna-se impraticável. Recentemente [M.H.F. Bettega, L.G. Ferreira e M.A.P. Lima, Phys. Rev. A 47, 1111 (1993)] implementamos os pseudopotenciais de Bachelet, Hamann e Schlüter ("soft" e "norm-conserving") no método multicanal de Schwinger (SMC), com o objetivo de aumentar o tamanho dos alvos moleculares. Isto é possível porque com o uso de pseudopotenciais, os elementos de matriz são calculados apenas para os orbitais de valência. Além disso, o fato de serem "soft" implica em funções de onda (atômicas) de valência suaves (pseudo funções de onda), que podem ser descritas por um número reduzido de Gaussianas. No entanto, na literatura, encontramos apenas Gaussianas para uso em cálculos envolvendo todos os elétrons (sem pseudopotencial). Propomos aqui um método para gerar funções Gaussianas, a partir de pseudo funções atômicas, para uso com pseudopotenciais. Os resultados obtidos com as funções geradas por este método, tanto para estrutura eletrônica quanto para espalhamento, são surpreendentemente bons.

FUNÇÕES DE GREEN PARA POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS DO TIPO: DELTA DE DIRAC + POTENCIAL DESCONTÍNUO

LUZ, M. G. E. DA
Unicamp - Campinas, SP
VICENTINI, E.; CHENG, B. K.
UFPR - Curitiba, PR

Basicamente, estuda-se a aproximação semiclássica em Mecânica Quântica por dois motivos. Um de ordem prática, pois pode fornecer técnicas apuradas de cálculo e outro de ordem conceitual, uma vez que é de fundamental importância no entendimento da passagem quântico \rightarrow clássico. Entretanto, existem certos tipos de sistemas onde a aproximação semiclássica não fornece bons resultados para o propagador. A exemplo disto temos os potenciais descontínuos: barreiras, paredes, etc.. É sabido também que, embora a aproximação semiclássica possa não fornecer bons resultados na representação temporal (propagadores) pode ter boa concordância na representação de energia (funções de Green). A fim de analisar estes tipos de problemas, discutimos as funções de Green para dois potenciais unidimensionais do tipo $W(x) = \delta(x-a) + V(x)$, onde $V(x)$ é um potencial descontínuo. Confrontamos os cálculos

exatos e semiclássicos e mostramos os limites de validade da aproximação semiclássica na representação de energia para estes dois sistemas em particular.

CÁLCULO DE "ONE-TIME GREEN'S FUNCTIONS" PARA ALGUNS SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS DEPENDENTES DO TEMPO

LUZ, M. G. E. DA
Unicamp - Campinas, SP
ROMAN, L. S.; CHENG, B. K.
UFPR - Curitiba, PR

Sistemas dependentes do tempo têm grande interesse em Mecânica Quântica. Fenômenos tais como transição induzida, dissipação, espalhamento não elástico, etc., podem ser descritos por potenciais do tipo $V(x, t)$. Infelizmente, soluções exatas para a eq. de Schrödinger dependente do tempo são de difícil obtenção. Além disso, certas técnicas aplicadas a sistemas independentes do tempo não têm sentido em sistemas dependentes do tempo, a exemplo do traço da função de Green que fornece a densidade de estados para um sistema independente do tempo mas que não é bem definido para um sistema dependente do tempo. Recentemente, Phys. Rev. A 47 (1993) 4720, introduzimos a idéia da "one-time Green's function" na tentativa de "criar" novas ferramentas para o estudo destes tipos de sistemas. Aqui, apresentamos a solução exata para três potenciais unidimensionais dependentes do tempo. Calculamos suas "one-time Green's functions" e discutimos seus significados físicos considerando: estados adiabáticos e aproximações semiclássicas.

ESTUDO TEÓRICO DAS MOLÉCULAS

$FeNH_3$ e $NiNH_3$
TERRA, J.; GUENZBURGER, D.
CBPF

Investigamos a estrutura eletrônica das moléculas $FeNH_3$ e $NiNH_3$ utilizando o método Variacional Discreto (DVM), desenvolvido no contexto da teoria do Funcional da Densidade, usando a teoria da densidade local para definir os potenciais de troca e de troca e correlação. As funções de onda monoelétrônicas da molécula são aproximadas por combinações lineares de orbitais atômicos (LCAO). Calculamos a energia total para diversas configurações do $FeNH_3$, considerando diversas distâncias Fe-N. O estado fundamental encontrado foi 5E , com uma configuração de aproximadamente $3d^{6.6}4s^{1.1}$ no Fe. Os parâmetros hiperfinos Mössbauer: gradiente de campo elétrico, deslocamento isomérico e parâmetros hiperfinos magnéticos também foram calculados no núcleo do Fe e comparados com os resultados experimentais obtidos da espectroscopia Mössbauer do $FeNH_3$ isolado em matriz

de amônia sólida (E.B.Saitovitch, J.Terra e F.J.Litterst, Phys. Rev. B39(1989)6403). Para a distância de equilíbrio Fe-N, encontramos o valor de 1.98Å. No caso do $NiNH_3$, consideramos somente o estado 3A_1 ; comparamos nossos resultados com aqueles existentes na literatura, obtidos por cálculos "ab-initio".

ESTUDO DA INTERAÇÃO DE DOIS ÁTOMOS DE H SPIN POLARIZADOS NUMA SUPERFÍCIE METÁLICA UTILIZANDO A APROXIMAÇÃO DO ESPAÇO LOCAL

MATOS, M.

Departamento de Física, PUC-Rio

KIRTMAN, B.

Dept. of Chemistry, University of California

Utilizamos a aproximação do espaço local (LSA) para estudar a interação entre dois átomos de hidrogênio numa superfície metálica infinita. Este estudo visa dar subsídios para o estudo da formação de interfaces e defeitos do tipo "degrau" ou "quina" em superfícies. Utilizamos a hamiltoniana tight-binding autoconsistente numa rede cúbica simples com um orbital por sítio e repulsão elétron-elétron no orbital 1s de H. Para a adsorção de um único átomo de H em W(100) já se mostrou^a que a energia de ligação $\Delta E_1(N)$ aproxima-se do valor limite $\Delta E_1(\infty)$ com um erro provável de 3% para $N = 18$, onde N é o tamanho do espaço local. Neste trabalho os resultados preliminares mostraram que a energia de ligação de dois átomos adsorvidos em sítios "top" vizinhos, para $N = 22$, apresenta um erro provável de $\sim 2\%$ nas configurações ferromagnética e antiferromagnética, o que corresponde a 0,15 eV. Sendo a interação $H-H$, muito fraca, $\Delta E_{H-H}^{\uparrow\uparrow} \sim 0,07$ eV e $\Delta E_{H-H}^{\uparrow\downarrow} = -0,13$ eV, para $N \approx 40$, recomenda-se utilizar espaços locais dessa ordem para o cálculo de interação mútua. No entanto a diferença na interação $H-H$ para as duas configurações de spin, converge rapidamente, com um erro provável de 0,06 eV para $N = 22$. Os cálculos LSA prevêm, que a configuração antiferromagnética é 0,20 eV mais estável de que a ferromagnética. Pretendemos investigar também sítios "bridge" bem como outras posições relativas entre os adsorbatos. Além disso pretende-se estudar quais são as configurações mais estáveis de spin para três e quatro átomos adsorvidos numa dada geometria.

^aM. Matos, B. Kirtman, C.P. Melo, J. Chem. Phys 88 (1988) 1019.

IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO DA FFT-2D PARA REDE DE TRANSPUTERS

ETO, R. F.; TRAVIESO, G.; SLAETS, J. F. W.

Grupo de Instrumentação e Informática (GII) Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

O presente trabalho descreve a implementação do algoritmo discreto da FFT-2D (Bidimensional) em uma rede baseada em transputers do tipo T800, utilizando uma interface da MICROWAY QUADPUTER com quatro transputers. A linguagem utilizada para a implementação é a OCCAM2. Apresentaremos algumas técnicas de paralelização, bem como sua aplicação no algoritmo da FFT-2D. Finalmente são apresentados os resultados do desempenho obtido por rede compostos de um, dois e quatro transputers.

O trabalho visa explorar o paralelismo tanto a nível de hardware quanto de software, a fim de avaliar uma futura implementação para o Tomógrafo de RM desenvolvido no Instituto (IFQSC-USP). Foi implementado neste trabalho o algoritmo da FFT-2D, pelo método "Radix-4", de tal forma que este possa ser executado por uma máquina paralela do tipo "Multiple Instruction stream - Multiple Data stream" (MIMD). Na parte implementada para hardware foi utilizado uma interface da MICROWAY QUADPUTER disponível no GII, onde sua arquitetura é baseada em transputers do tipo T800, escolhido devido as facilidades intrínsecas desse circuito integrado em implementar as comunicações entre os processadores e também pela possibilidade de ter como computador hospedeiro um micro do tipo PC-XT, e na implementação do software paralelo dedicado ao algoritmo da FFT-2D foi utilizado a linguagem OCCAM2, que é uma linguagem de alto nível especialmente adaptada para explorar o paralelismo do transputer, baseado nos conceitos de processos comunicantes introduzido por [HOA-78].

Cálculo tridimensional dependente do tempo para a fotodissociação de H_2S

ROCHA FILHO, T. M. DA; BRITO, A. N. DE; SOUSA, A. A.

Departamento de Física - UnB

Apresentamos um cálculo tridimensional dependente do tempo para a fotodissociação de H_2S . As funções de onda utilizadas são representadas em um grade numérica adaptada ao sistema de coordenadas usado. Para coordenadas cartesianas tomamos uma distribuição de pontos igualmente espaçados enquanto que para a coordenada angular a distribuição de pontos é a obtida usando-se o método da representação em variáveis discretas (RVD). A ação da hamiltoniana livre sobre a função de onda é então calculada usando-se o método de Kosloff que utiliza uma transformação rápida de Fourier e a RVD. A seção de choque total em função da frequência do fóton é obtida a partir da função de correlação, que por sua vez é calculada na

descrição de interação, que propicia maior precisão e estabilidade no cálculos das integrais envolvidas. Calculamos também as probabilidades de excitação vibracional nuclear dos fragmentos resultantes da dissociação.

CURVAS DE DISSOCIAÇÃO UTILIZANDO MÉTODO ALGÉBRICO

DARDENNE, L. E.; WERNECK, A. S.; MAKIUCHI, N.; VIANNA, J. D. M.

Universidade de Brasília

MOREIRA SOBRINHO, A. C.; MALBOUISSON, L. A. C.

Universidade Federal da Bahia

O Método Algébrico (MA) foi desenvolvido recentemente pelo nosso grupo para resolver as equações de Hartree-Fock-Roothaan (HFR) e Hartree-Fock-Pople-Nesbet (HF-PN). Em princípio, utilizando o procedimento MA, pode-se determinar todos os pontos de extremo (mínimos, máximos e pontos de sela) do funcional energia de Hartree-Fock (HF) como função dos orbitais moleculares os quais são expressos em termos de uma expansão de orbitais atômicos (expansão LCAO). Através do MA pode-se obter todas as múltiplas soluções de HF inclusive aquelas que poderiam ser encontradas utilizando-se o procedimento do método auto-consistente, seja com regra usual de ocupação "aufbau" seja com regras de ocupação arbitrárias (soluções não usuais). Uma das vantagens do MA está na possibilidade de se obter soluções que não são obtidas pelo método auto-consistente por problemas de convergência. É importante ressaltar que estas múltiplas soluções, por corresponderem a diferentes pontos de extremo da hipersuperfície de energia do funcional HF não são necessariamente mutuamente ortogonais. Neste trabalho utilizamos o MA juntamente com o método auto-consistente com diversas regras de ordenamento para encontrar as curvas de dissociação dos sistemas diatômicos F_2 e CO para estados de spin singlete. São analisados os problemas de convergência e o número de múltiplas soluções encontradas para cálculos utilizando-se diversas bases de orbitais atômicos na expansão LCAO.

MÉTODO DE INTERAÇÃO DE CONFIGURAÇÕES A PARTIR DO MÉTODO ALGÉBRICO. SISTEMAS DIATÔMICOS.

DARDENNE, L. E.; WERNECK, A. S.; MAKIUCHI, N.; VIANNA, J. D. M.

Universidade de Brasília

MOREIRA SOBRINHO, A. C.; MALBOUISSON, L. A. C.

Universidade Federal da Bahia

Muitos métodos têm sido utilizados no sentido de determinar a energia de correlação em átomos e moléculas.

O método de interação de configurações (CI) está entre os de aplicação mais geral. Porém as expansões CI, mesmo para moléculas pequenas e para bases moderadas de orbitais atômicos, atingem rapidamente dimensões muito grades e extremamente difíceis de serem tratadas do ponto de vista computacional. Deste modo é importante procurar alternativas que conduzam a cálculos os mais eficientes possíveis através de expansões limitadas no seu número de configurações porém com resultados de uma certa acurácia. No CI usual, utilizam-se configurações originadas de um único estado de referência Hartree-Fock e em consequência disto mutuamente ortogonais. No nosso trabalho utilizamos uma base CI não-ortogonal formada a partir de vários estados de referência HF calculados utilizando-se o Método Algébrico, desenvolvido em nosso grupo, em conjunto com o método usual auto-consistente (SCF) para diversas regras de ocupação. Realizamos cálculos de correlação eletrônica utilizando o método CI com base não-ortogonal nos sistemas F_2 e CO para diversas distâncias interatômicas e utilizando-se diversas bases atômicas na expansão LCAO. Os nossos resultados são comparados com os do CI usual ortogonal em termos de número de configurações utilizadas versus precisão na energia total. É também realizada uma análise comparativa com cálculos CI utilizando-se orbitais naturais e com cálculos MCSCF.

NOVO MÉTODO DE TRATAMENTO PARA O CÁLCULO DA SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL DE ABSORÇÃO DE RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA EM ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NA PRESENÇA DE CAMPO DE LASER INTENSO

PEREIRA, R. B.; FONSECA, A. L. DE A.

Universidade de Brasília

Neste trabalho apresenta-se uma nova abordagem para o cálculo da seção de choque diferencial de absorção de radiação eletromagnética em átomo de hidrogênio na presença de campo de laser intenso. O formalismo utilizado é o da matriz-S e a Hamiltoniana de interação é aquela encontrada com o uso do gauge de campo elétrico. Como função de onda inicial usa-se a função de onda obtida por O.L.Silva Filho e A.L.A.Fonseca, por meio do "Novo Método de Tratamento da Equação de Schrödinger à uma Partícula" (esse novo método faz uso de idéias do método perturbativo e variacional, privilegiando, contudo, a equação diferencial). É necessário que se faça uma transformação unitária nesta função de onda a fim de que a invariância de gauge seja obedecida. O caso em consideração é aquele no qual os elétrons absorvem mais fótons que o número mínimo exigido para alcançar o contínuo; dessa forma no estado final os elétrons interagem com o campo de laser e com o íon residual, de modo que a função de onda

final deverá conter a influência tanto do campo de laser quanto do campo de Coulomb do íon residual. Devido à complexidade das expressões obtidas, utiliza-se computação algébrica para a obtenção dos resultados numéricos e gráficos.

UMA NOVA FORMA VARIACIONAL PARA O ORBITAL 1S DE ÁTOMOS DE DOIS ELÉTRONS

QUINTÃO, A. D.; GOMES, O. A.; CHACHAM, H.; MOHALLEM, J. R.
UFMG

Recentemente, nós realizamos um cálculo variacional bastante preciso de um elétron no potencial de Yukawa [1]. A função de onda variacional obtida é uma função composta de dois termos, ambos tendo sido usados individualmente na literatura como excelentes aproximações do orbital Hartree-Fock no átomo de Hélio. Estamos realizando um cálculo variacional para átomos de dois elétrons, H^- e He , com essa nova função, com o objetivo de testar a sua qualidade, inclusive na obtenção de outras propriedades além da energia, para cálculos atômicos e moleculares.

[1] O. A. Gomes, H. Chacham e J. R. Mohallem, submetido para Phys. Rev. A

RAYLEIGH-RITZ VARIATIONAL SPECTRA OF THE POTENTIAL $V(x) = \beta x^2 + \lambda|x|^p$,

($p = 3, 5, 7$)†

MATOS, J. M. O.; GONÇALVES, L. L.
UFCE

The Schrödinger equation is numerically solved for the one-dimensional potential $V(x) = \beta x^2 + \lambda|x|^p$ ($p=3,5,7$), assuming two variationally scaled basis sets, harmonic oscillator¹ and square well eigenstates², and by using successive approximations in the framework of the Rayleigh-Ritz variational method. The convergence of the eigenvalues is verified by using MacDonald's theorem³, and the accuracy of the wave functions is verified by comparing the transition moments computed from two different expressions for each basis set. In order to better study the convergence of the method for the two basis sets, a test calculation is performed for $p=1$ and the results compared to the known exact ones.

[1] J.M.O.Matos and L.L.Gonçalves, Braz. J. Phys. 24, (...) (1994)

[2] M.A.M.de Aguiar and A.L.Xavier Jr., Phys. Lett. A164, 279(1992)

[3] J. K. L. MacDonald, Phys. Rev. 15, 830(1933)

†Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq and Finep.

ESPALHAMENTO DE PACOTES DE ONDA CONSIDERANDO CONDIÇÕES DE CONTORNO NÃO USUAIS

LUZ, M. G. E. DA

Unicamp - Campinas, SP

CHENG, B. K.; ROCHA, L. R. B.; SOUZA, M. A. S. DE; SANTOS, D. D.

UFPR - Curitiba, PR

Recentemente na literatura, tem-se estudado sistemas quânticos onde se considera condições de contorno mais gerais para as funções de onda do que as comumente apresentadas em livros textos. Estes tipos de sistemas apresentam comportamentos muito interessantes com relação à estados ligados, aproximações semiclássicas, espalhamento, etc.. Para ampliarmos um pouco mais o conhecimento deste "novo mundo quântico", consideramos no presente trabalho um pacote Gaussiano interagindo com um potencial tipo parede infinita, que se move com velocidade constante. Entretanto, não impomos condições de contorno usuais para estes tipos de potenciais, ou seja, condições de Dirichlet, mas sim, admitimos condições de contorno mais gerais. Resultados não usuais relativos à espalhamento não elástico e aproximação semiclássica são encontrados.

ESTUDO DE AGLOMERADOS DE SILÍCIO-GERMÂNIO VIA DINÂMICA MOLECULAR

LEMES, M. R.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - São José dos Campos-SP

PINO JÚNIOR, A. D.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - São José dos Campos-SP

As técnicas de dinâmica molecular e recozimento simulado são combinadas a um recém desenvolvido método semi-empírico para investigar as geometrias de equilíbrio, energias, e frequências vibracionais de pequenos aglomerados de silício-germânio. Desenvolvemos um código computacional que faz a parte da dinâmica molecular, bem como a parte de recozimento simulado. Este esquema é comparado com resultados ab initio para os estados fundamentais de pequenos aglomerados. Para os cálculos ab initio utilizamos o código computacional Gamess. Para os sistemas onde ambos os métodos puderam ser aplicados os resultados de energia e geometria molecular são quase idênticos. Concluímos que a aplicação deste método a aglomerados maiores, onde os cálculos de primeiros princípios são proibitivos, são promissores.

A Theoretical Study of the Transition Moments, Transition Probabilities and Radiative Lifetimes of the Doublet States of

BeH

IEAV-CTA,

Francisco Bolivar Correto Machado, Orlando Roberto Neto

IQ-USP,

Fernando Rei Ornellas

The BeH molecule has been the subject of a large number of experimental and theoretical studies. These have been centered mostly on the determination of potential energy curves of the $X^2\Sigma^+$ ground state and of several high lying $^2\Sigma^+$ and $^2\Pi$ states, and on the computation of associated vibrational and rotational energies and spectroscopic constants. However, data related to the calculation of transition probabilities and radiative lifetimes are scarce or non-existent.

The aim of this study was to compute the electronic transition moment and the vibrational wavefunction for selected doublet states, in order to calculate their ro-vibrational transition probabilities and radiative lifetimes.

These calculations were carried out at the MRSD-CI level. Extended sets of Cartesian Gaussians, (13s9p4d1f)/[9s7p4d1f] for beryllium and (8s2p2d)/[5s2p2d] for hydrogen, were used in the construction of the molecular orbitals. Since the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ equilibrium distances are very close, 1.343 and 1.334 Å, the intensity is expected to concentrate in transitions $\Delta v = \pm 1$; this behaviour is also reflected in the diagonal Franck-Condon factors calculated with values close to 1.0. For the $^2\Sigma^+$ and $C^2\Sigma^+$ states, whose equilibrium distances are separated by $\simeq 1.00$ Å, the most intense calculated bands are 0-7, 0-8 and 0-9 as observed experimentally. For the ($X^2\Sigma^+ - B^2\Pi$) system, the experimental violet degraded sequence, composed of 0-0, 1-1, 2-2 and 3-3 bands is reflected theoretically in the variations of the transition moment function and in the potential energy curves in the region close to 5.5 Å. Calculated radiative lifetimes for $v = 0, 1$ and 2 are 82, 86 and 89 ns for the (X-A) transition; 249, 257 and

280 ns for (X-C) and 55, 44 and 20 ns for the (X-B) band system.

SOLUÇÕES QUÂNTICAS EXATAS PARA UM POTENCIAL TIPO PAREDE INFINITA QUE SE MOVE COM VELOCIDADE CONSTANTE CONSIDERANDO CONDIÇÕES DE CONTORNO MAIS

GERAIS

LUZ, M. G. E. DA

Unicamp - Campinas, SP

CHENG, B. K.

UFPR - Curitiba, PR

A literatura é escassa em soluções exatas para sistemas dependentes do tempo. Entretanto, estes têm grande importância no estudo de transições estimuladas, dissipação, espalhamento não elástico, etc.. Outra lacuna na literatura, raros poucos trabalhos, é o estudo de condições de contorno mais gerais para as funções de onda de um sistema quântico. O presente visa contribuir com mais uma solução exata para os tipos de sistemas descritos acima. Primeiramente, resolvemos a equação de Schrödinger de uma partícula unidimensional que interage com uma parede infinita movendo-se com velocidade constante u , sendo que para a função de onda consideramos a seguinte condição de contorno dependente do tempo, $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)|_{x=ut} = \alpha\psi(x,t)|_{x=ut}$. Então, obtemos o propagador exato através do método de expansão espectral. Finalmente, para o caso da parede estacionária, calculamos a função de Green para nosso sistema com e sem uma perturbação tipo função delta.

Física Atômica e Molecular I: Experimental (ATO) - 09/06/94

EXPERIMENTOS COM ÁTOMOS SUPER-FRIOS MANTIDOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS

BAGNATO, V.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IF, USP São Carlos

O desenvolvimento de técnicas modernas para resfriar e aprisionar átomos neutros criou novos sistemas físicos, possibilitando o estudo de fenômenos que até pouco tempo eram considerados impossíveis. Átomos à temperaturas de 10^{-6} K comportam-se quanticamente durante colisões, são facilmente manipulados por pequenas forças exercidas pela radiação, abrindo novos caminhos na inovante técnicas que procura controlar a entidade atômica. Através do conveniente uso da pressão da radiação, vários grupos de pesquisa em todo mundo têm desenvolvido maneiras de produzir distribuições espaciais envolvendo átomos frios. Apresentaremos os últimos desenvolvimentos nesta área incluindo a utilização da chamada de força de vortex macroscópica, através da qual átomos presos em armadilhas distribuem-se em distintas estruturas, sendo possível produzir o equivalente a transições de fase estrutural com a variação dos parâmetros da força de radiação. Além das estruturas espaciais, uma área de extrema importância

para átomos frios é o estudo de colisões atômicas. Neste caso, estando muito lentos, o comprimento de onda de De Broglie chega a ser comparável ao alcance dos potenciais de interação, criando uma situação onde um tratamento completamente quântico da colisão se faz necessário. Além disto, colisões envolvendo átomos excitados sofrem grandes modificações porque neste novo regime, o tempo de colisão é da mesma ordem, ou mesmo maior, do que o tempo de vida dos estados excitados. Emissão espontânea passa a ter um papel fundamental no processo. Apresentaremos os resultados mais recentes envolvendo colisões com átomos frios e um primeiro estudo sobre a observação de estados intermediários em uma reação química.

(Este trabalho tem suporte financeiro da Fapesp, CNPq e Finep. O autor agradece o esforço e dedicação de todos os membros do grupo de Física Atômica e Molecular: estudantes, visitantes e docentes).

FRANJAS DE INTERFERÊNCIA NUM FEIXE ATÔMICO DE SÓDIO DEVIDO À MODULAÇÃO DA POPULAÇÃO EM DUAS REGIÕES ESPACIALMENTE SEPARADAS.

MAREGA JR, E.; BAGNATO, V. S.; ZÍLIO, S. C.

*Departamento de Física e Ciência dos
Materias-IFQSC-USP*

Apresentamos neste trabalho a observação de franjas de interferência na região óptica do espectro, devido à modulação da população atômica em duas regiões distintas do feixe atômico[1]. Dois campos ópticos quase degenerados quando em ressonância com uma transição atômica, criam uma modulação na população do estado fundamental, que acabam interferindo-se, quando os campos interagem com o feixe em duas regiões distintas. A largura e a forma das franjas tem a mesma dependência que as franjas de Ramsey observadas no método original[2]. 1-E. Marega Jr., V.S. Bagnato, S.C. Zílio, *Opt.Lett.*18,20(1993). 2-J.E. Thomas, S. Ezekiel, C.C. Leiby, R.H. Picard, C.R. Wills, *Opt. Lett.* 6,298(1981)

DIAGRAMA DE FASE EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICA: UM ESTUDO MAIS REFINADO

FARIA, C. F. DE M.; MARCASSA, L. G.; BAGNATO, V. S.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Desde que a armadilha magneto-óptica foi realizada pela primeira vez, estranhas formas foram observadas para a distribuições espaciais de átomos frios. Com o objetivo de explicar tais estruturas estranhas (anéis, anéis com centro, esferas) surgiram nos últimos anos duas teorias. A primeira desenvolvida pelo grupo do Prof. C. Wieman, a qual relaciona tais estruturas com a existência de um comportamento coletivo do sistema. E prediz que estas estruturas apresentam uma forte dependência com o número total de átomos aprisionados. A segunda desenvolvida por nosso grupo utiliza a teoria Doppler com algumas modificações; onde consideramos o perfil gaussiano de intensidade dos feixes e o desalinhamento entre eles. Em sua primeira versão a teoria não considerou a influência de todos os feixes na taxa de absorção de um deles, ou seja a força que

cada um exerce sobre o sistema atômico é independente dos demais. Esta teoria apresentou resultados qualitativos satisfatório, embora seus resultados quantitativos sejam infelizes. Neste trabalho aprimoramos esta teoria para um modelo tridimensional; onde passamos a considerar a influência de todos os demais feixes no parâmetro de saturação de um deles. Utilizando este parâmetro de saturação corrigido estudamos o comportamento do raio dos anéis com os parâmetros da armadilha (campo magnético, detuning, intensidade, desalinhamento). Observamos que a teoria reproduz todos os comportamentos dos raios dos anéis, qualitativamente e quantitativamente. E apresentamos um "diagrama de fase" a partir desta teoria corrigida. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

CO-DESACELERAÇÃO DE Na E Li PELA TÉCNICA DE AJUSTE ZEEMAN.

FLEMMING, J.; SANTOS, M. S. DOS; BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP

O estudo de desaceleração dos alcalinos pela técnica de ajuste Zeeman vem sendo feito em nosso laboratório de forma sistemática. As várias técnicas de desaceleração existentes na literatura foram aplicadas a cada alcalino independentemente. Devido ao nosso grande interesse no estudo de colisões lentas, fizemos uma co-desaceleração de dois alcalinos (Na e Li). É necessário que o fluxo de átomos de Na e Li seja de mesma ordem para que nenhuma das respectivas fluorescências em 589 Å e 671 Å seja mascarada pela presença da outra. Devido à grande diferença de pressões de vapor do Na e do Li, fluxos atômicos idênticos só podem ser obtidos utilizando-se, como carga para o forno, uma liga extremamente rica em Li. A liga utilizada, calculada pela lei de Raoult para uma temperatura do forno de 700°C foi $\text{Li}_{97,5}\text{Na}_{2,5}$ (relação em pesos atômicos). Utilizou-se dois feixes de corante DCM e R6G, contra-propagantes ao feixe atômico duplo. O laser em 671 Å passa por um modulador eletro-óptico, que cria "sidebands" para rebombear opticamente os átomos de Li para a transição de interesse. Durante a desaceleração os átomos são mantidos em ressonância utilizando-se um campo magnético variável espacialmente (técnica de ajuste Zeeman). Como não dispomos de dois lasers adi-

cionais para atuarem como laser de prova, o processo de desaceleração foi monitorado por um detetor de Si que correão longo do feixe atômico [1]. Os resultados preliminares mostram que ocorre a co-desaceleração, mas que devido a alta temperatura necessária, a velocidade inicial média dos átomos é grande, diminuindo a porcentagem do que é conseguido na desaceleração.

[1] V.S. Bagnato, A. Aspect and S.C. Zilio, *Optics Commun.* **72** (1980) 76.

Física Atômica e Molecular II: Experimental (ATO) – 09/06/94

DINÂMICA DO PROCESSO DE FORMAÇÃO DE ÓRBITAS ESTÁVEIS DE ÁTOMOS NEUTROS APRISIONADOS POR ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS

SILVA, I. G. DA; ARAUJO, M. T. DE; MILORI, D. M. B. P.; BAGNATO, V. S.; ZILIO, S. C.

*Instituto de Física e Química de São Carlos /
Universidade de São Paulo*

A distribuição espacial de átomos aprisionados por armadilhas magneto-ópticas têm forte dependência com a configuração geométrica dos feixes de laser usados para o aprisionamento. Com um desalinhamento relativo entre os feixes, observou-se a formação de distribuições espaciais de átomos frios em forma de anel e anel circundando uma nuvem de átomos confinados [1,2]. Para explicar a formação destas estruturas, foi proposto um modelo baseado na força de confinamento da radiação [2] e na força que surge do desbalanço de intensidade devido ao desalinhamento dos feixes de aprisionamento. Neste modelo, os raios das órbitas circulares dependem do número de átomos aprisionados e não dependem significativamente do desalinhamento dos feixes da armadilha. Neste caso, a força de confinamento da radiação é responsável pela formação das órbitas estáveis. Entretanto, outro trabalho surgiu na literatura [3] onde os autores obtiveram distribuições espaciais semelhantes as das referências [1,2] sem, no entanto, observar-se nenhuma variação do raio destas distribuições como função do número de átomos aprisionados. Os autores propuseram um modelo baseado apenas na força macroscópica que depende das coordenadas que surge devido ao desalinhamento dos feixes, para explicar as órbitas circulares estáveis. Surge, então, uma contradição, que como veremos neste trabalho, é apenas aparente. Observamos que dependendo do número de átomos aprisionados, a dinâmica do processo de formação das órbitas estáveis é diferente. Dois tipos de experimentos foram realizados, onde variamos drasticamente o número de átomos aprisionados para a comprovação do novo modelo [4].

[1] E. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu and D. Pritchard, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2631 (1987).

[2] T. Walker, D. Sesko and C. Wieman, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 408 (1990).

[3] V.S. Bagnato, L.G. Marcassa, M. Oriá, G.I. Surdutovich and S.C. Zilio, *Laser Phys.* **2**, 172 (1992).

[4] I. Guedes, M.T. de Araujo, D.M.B.P. Milori, G.I. Surdutovich, V.S. Bagnato and S.C. Zilio, submetido ao *J. Opt. Soc. Am. B.*

A feasibility study for slowing of Rb atoms with isotropic light

BATELAAN, H.; PÁDUA†, S.; YANG, D. H.; XIE, C.; GUPTA, R.; METCALF, H.

State Univ. of N. York at Stony Brook

We have demonstrated slowing and acceleration by isotropic monochromatic light in a atomic rubidium beam. Isotropic light is generated by a laser beam incident in a hollow cylinder tube made of a Lambertian reflector material. Atoms are slowed by absorbing light counter-propagating to their motion direction. Because of the resonance condition, atoms absorb preferentially from a light cone with smaller internal angle, as their velocity decrease. A similar physical explanation can be given for the acceleration process. The experimental results are in a reasonable agreement with a model calculation allowing for a predictable isotropic slower design. The larger hyperfine splitting of rubidium lead to a natural multi-frequency slowing, which is also included in our model. This is shown in our results where Rb atoms are slowed to two lower velocities peaks.

Supported by NSF, AFOSR, and CAPES†.

(†) Present adress: Departamento de Física - UFMG.

Garrafa Ótica para Átomos Neutros

ORÍ, M. C. S.; LORENZO FILHO, O.; FREITAS NETO, U.

Departamento de Física - UFPB

A demonstração experimental [1] do funcionamento da armadilha magneto-ótica para átomos neutros em células, abriu a possibilidade de se produzir, de maneira relativamente simples, uma amostra de átomos frios. Vários estudos foram realizados então para a otimização do número de átomos e da densidade dessa amostra [2]. Porém em todas as situações estudadas até a presente o “gás de fundo” obedece a distribuição térmica de Maxwell-Boltzmann. Essa premissa tem como consequência, por exemplo, um limite superior para o número máximo de átomos aprisionados em função dos parâmetros da armadilha e que independe da pressão do vapor térmico. Nós propomos nesse trabalho uma técnica para a obtenção de uma distribuição de velocidades que tenha uma concentração de átomos com pequenas velocidades superior a da distribuição de Maxwell-Boltzmann, às custas do número

de átomos em classes de velocidades elevadas. Em uma dimensão essa técnica consiste em utilizar o "potencial" repulsivo de ondas evanescentes [3] nas paredes da caixa unidimensional e, adicionalmente um "melasso ótico", devido a dois feixes contrapropagantes e sintonizados abaixo da frequência do pico de transição atômica, cria um meio dissipativo para a energia cinética dos átomos a baixa da velocidade [4]. Em nossas simulações numéricas consideramos que os átomos que se chocam com as paredes da caixa a uma dimensão são termalizadas: os átomos voltam então ao vapor em qualquer classe de velocidade, com probabilidade definida pela curva de Maxwell-Boltzmann para a temperatura das paredes. Gráficos de simulações numéricas mostram efetivamente um aumento relativo para as pequenas velocidades em relação a uma distribuição térmica.

[1] C. Monroe et al, Phys. Rev. Lett. 65, 1571 (1990)

[2] K. Lindquist et al, Phys. Rev. A46, 4082 (1992)

[3] R. J. Cook and R. K. Hill, Opt. Commun. 43, 258 (1992)

[4] J. Opt. Soc. Am. B6, 22 (1989) Special Issue on Laser Cooling and Trapping

ESTUDO DE PROCESSOS REACIONAIS EM PÓS-DESCARGA DE NITROGÊNIO EM PRESENÇA DE IMPUREZAS.

SOUZA, A. R. DE; DIGIACOMO, M.; PEREIRA, C.
Depto. Física/LABMAT-UFSC

Pós-descargas em fluxo apresentam um grande interesse tanto do ponto de vista fundamental (estudos de processos de transferência de carga e de excitação), quanto em aplicações (nitretação de superfícies metálicas e oxidação de polímeros). No que concerne às pós-descargas de Nitrogênio em misturas com outros gases, vários aspectos apresentam grande interesse principalmente devido sua utilização em processos de nitretação. Neste trabalho, apresentamos um estudo experimental realizado em pós-descargas em fluxo, de nitrogênio contendo traços de CH_4 e H_2 . Através de espectroscopia de emissão, é determinado que traços destas moléculas, introduzidas na descarga, aumentam a dissociação do nitrogênio em valores superiores a 100%. Estes resultados são interpretados como uma diminuição do coeficiente de recombinação na parede do tubo devido à presença das impurezas. O espectro da pós-descarga apresenta também intensas emissões de CN excitado, quando CH_4 é introduzido na descarga. O estudo da variação da intensidade de bandas de CN em função da concentração de nitrogênio no estado atômico, é também realizado no intuito de determinar o processo de formação deste radical. Os resultados mostram que a interpretação destas emissões pode ser feita em termos da reação $C + N \rightarrow CN(A)$.

First observation of an anomalous Auger decay

ratio from the molecular field split S 2p levels to $X^1A_1(2b_1^{-2})$ in the H_2S , measured by Auger and x-ray photoelectron spectroscopies

SVENSSON, S.

Uppsala University (Sweden)

BRITO, A. N. DE

The Finnish Synchrotron Facility at Max-lab (Sweden)

Present institution: University of Brasília

AUSMEES, A.; OSBORNE, S. J.; BRAY, G.

Uppsala University (Sweden)

GEL'MUKHANOV, F.; AGREN, H.

University of Linköping (Sweden)

SAIRANEN, O.; KIVIMÄKI, A.; NOMMISTE, E.;

AKSELA, H.; AKSELA, S.

University of Oulu (Finland)

Different values for the spin-orbit splitting of $S2p_{3/2}$ and $S2p_{1/2}$ levels have been measured by Auger and photoelectron spectroscopies [1]. Using high resolution synchrotron excited Auger and photoelectron spectra this apparent ambiguity is solved. For the first time the molecular field splitting in the " $2p_{3/2}$ " is observed to be 110(5) meV [2]. The difference in spin orbit splitting is explained in terms of a new propensity rule for Auger decay from molecular field split levels. The measurements also provide a new value for the $S2p$ life time width of 70(10) meV. In addition, a few weak vibrationally excited states are seen in the photoelectron spectrum, assigned to the symmetric stretching mode ν_1 . The measurements have been carried out on the so called Finnish beam line at Max-lab in Lund, Sweden

[1] S. Svensson, A. Naves de Brito, M. P. Keane, N. Correia and L. Karlsson Phys. Rev A43 (1991) 6441.

[2] S. Svensson, A. Ausmees, S. J. Osborne, G. Bray, F. Gel'mukhanov, H. Agren, A. Naves de Brito, O.-P. Sairanen, A. Kivimäki, E. Nömmiste, H. Aksela and S. Aksela. submitted for publication in Phys Rev. Lett.

ESPECTRO DE ABSORÇÃO DO $^{13}CH_3OH$:

Evidência de estados misturados

MORAES, J. C. S.

Unesp-Ilha Solteira

PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.

DEQ-Unicamp

MORUZZI, G.; STRUMIA, F.

Università di Pisa

WINNEWISSER, B.; WINNEWISSER, M.

Physikalisch-Chemisches Institut der

Justus-Liebig-Universität, Giessen-Federal Republic of Germany

Em nossa investigação sistemática de espectros a Transformada de Fourier, no Infra-Vermelho (IV) e Infra-Vermelho Longínquo (IVL), da molécula $^{13}CH_3OH$, temos "assigned" (identificação dos números quânticos envolvidos numa transição) mais de 10.000 linhas de

absorção. Todas estas linhas possuem frequência entre 25 a 350 cm^{-1} (região IVL). Devido a leve assimetria da molécula, coincidências acidentais podem induzir misturas de funções de onda, que podem acarretar o aparecimento de perturbações e permitir também que transições "proibidas" (não previstas pela regra de seleção) ocorram. No presente trabalho temos encontrado evidência de estados perturbados, já observados anteriormente ^a, e de transições "proibidas" que não tinham sido observadas até o momento. Estas novas séries de transições "proibidas" são devido a mistura dos níveis ($n=1, K=4$)A e ($n=1, K=6$)A, e ($n=1, K=8$)A e ($n=1, K=9$)A. Dentre elas, encontramos transições do tipo-b com $\Delta K=2$ e 3 e do tipo-a ($\Delta K=0$) dentro do mesmo estado vibracional.

Apoio Fianceiro: FUNDUNESP, FAPESP e CNPq.

^aI. Mukhopadhyay, R.M. Lees, and J.W.C. Johns. Int. Journal of Infrared and MM Waves, v9, no. 12, 1119 (1988)

Física Atômica e Molecular II (ATO)
- 09/06/94

**CARACTERIZAÇÃO DA EXPANSÃO DE
UF₆ EM FEIXE MOLECULAR
SUPERSÔNICO POR ESPECTROSCOPIA
INFRAVERMELHA**

SBAMPATO, M. E.; ANTUNES, L. M. D.; SENA, S.
C. DE; MIRANDA, S. F. DE

CTA/IEAv - Divisão de Lasers - São José dos Campos -
SP

Neste trabalho foi estudada a expansão supersônica contínua de UF₆ puro e em misturas com argônio e nitrogênio através de uma tubeira de perfil reto, utilizando a espectroscopia infravermelha de baixa resolução na região da banda de absorção ν_3 (626,0 cm^{-1}). A expansão foi feita em um sistema de resfriamento dinâmico (SRD) numa tubeira supersônica de orifício de 0,7 mm. Os espectros foram obtidos com um espectrofotômetro de rede, fazendo-se o feixe de prova cruzar o feixe molecular a 90°. Foram expandidas amostras com pressões de estagnação iniciais de 10, 20 e 50 Torr, em frações molares entre 0,20 e 1,0 nos gases de arraste. Obteve-se a temperatura das moléculas no feixe por comparação da largura da banda ν_3 com a de espectros teóricos. A densidade de moléculas no feixe, obtida através da medida da área da banda, foi comparada com a obtida por simulação da expansão. Os resultados experimentais mostraram uma variação na temperatura das amostras de 220K ($x_{\text{UF}_6}=1,0$) a 126K ($x_{\text{UF}_6}=0,33$) para a expansão com argônio, e de 220K a 122K ($x_{\text{UF}_6}=0,25$) para expansão com nitrogênio e pressão inicial de UF₆ de 50 Torr. Para

frações molares de UF₆ menores, os espectros começam a alargar aparecendo ombros e bandas nas regiões de 650, 640 e 610 cm^{-1} , indicando um aquecimento de amostra e formação de aglomerados. Antes de começar a formar aglomerados, os feixes produzidos com a expansão de UF₆ com argônio são sempre mais resfriados do que os produzidos com nitrogênio, nas mesmas condições. As experiências com pressões de UF₆ menores mostraram comportamento similar. Os resultados levam à conclusão de que a expansão com argônio é mais eficiente para resfriar o UF₆ e que a formação de aglomerados leva ao aquecimento do feixe molecular, devido à liberação do calor de formação dos mesmos.

**INFLUÊNCIA DO POLIMORFISMO EM
BANDAS VIBRACIONAIS DE MOLÉCULAS
DO TIPO PH₂X (NO₂)₂ - NA POSIÇÃO
PARA E X = O, S, Se.**

SAKANE, K. K.

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

BASSI, D.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

Neste trabalho, são mostradas através dos espectros no infravermelho, as diferenças polimórficas das moléculas do tipo Ph₂X (X=O, S, Se) com substituintes NO₂ na posição PARA, na região de 800 - 670 cm^{-1} . As alterações nas bandas são discutidas com base nas comparações empíricas com outros compostos semelhantes e nos resultados da análise de coordenadas normais (NCA). As bandas de deformação fora do plano, γ_{CH} , e do esqueleto do anel aromático, ϕ_{CC} , apresentam alterações significativas entre as formas estável α e metaestável β . O "overlapping" de bandas para cada um dos modos, em uma forma apresenta desdobramentos na outra forma com o aparecimento de novas bandas, ombros ou assimetria. Esses resultados são confirmados pelo NCA que mostra que os desdobramentos ocorrem nas bandas de deformações fora do plano. Como o polimorfismo envolve empacotamentos diferentes, as bandas correspondentes às deformações fora do plano são mais afetadas. Quando γ_{CH} desdobra, o modo ϕ_{CC} também desdobra. O número de bandas nesta região varia em função do átomo central X. A diferença em número de ondas entre as espécies α e β depende da interação vibracional envolvendo o átomo central X.

IONIZAÇÃO ASSOCIATIVA EM COLISÕES ENTRE ÁTOMOS ULTRAFRIOS DE SÓDIO EM QUATRO ETAPAS

MARCASSA, L. G.; QUEIROZ, E. V.; MUNIZ, S.;
BAGNATO, V. S.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Colisões em átomos aprisionados ocorrem em um intervalo de tempo muito maior que o tempo de vida do estado excitado da transição de interesse. Assim a absorção e a emissão espontânea não podem mais serem consideradas como perturbação à colisão. Neste trabalho utilizamos um tratamento semi-clássico para considerar tais aspectos do processo de Ionização Associativa (IA) que ocorre em quatro etapas distintas. Na primeira dois átomos de Na (ambos no estado fundamental) começam a colidir e absorvem um fóton ω_1 . A partir daí passam para um potencial do $\text{Na}^*\text{-Na}$ que é da forma $-R^{-3}$. Sob a influência deste potencial os átomos são acelerados um contra o outro, aumentando assim sua energia cinética. Logo após absorvem um segundo fóton ω_2 e passam para o estado $\text{Na}^*\text{-Na}^*$ e continuam o processo de colisão. Quando a distância radial entre eles for menor que 10 \AA haverá a ionização. Esquematicamente o processo é descrito por $\text{Na} + \text{Na} + \hbar\omega_1 \Rightarrow \text{Na} + \text{Na}^*$, o movimento do par, $\text{Na}^* + \text{Na} + \hbar\omega_2 \Rightarrow \text{Na}^* + \text{Na}^* \Rightarrow \text{Na}_2^+ + e^-$. Para concluir comparamos os resultados experimentais com as previsões teóricas obtidas a partir do tratamento semi-clássico. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

SUPRESSÃO ÓPTICA DE COLISÕES ENVOLVENDO ÁTOMOS FRIOS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICA

MARCASSA, L. G.; MUNIZ, S. C.; QUEIROZ, E. V.;
ZÍLIO, S. C.; BAGNATO, V. S.; WEINER, J.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Trabalhos recentemente realizados pelo nosso grupo, (Phys. Rev. Lett. 70, 3225 (93)), mostraram que o processo de foto-ionização associativa (FAI) ocorre em quatro passos. Num primeiro passo dois átomos no estado fundamental começam o processo de colisão. Absorvendo um fóton quando ainda na região de longo alcance, o par sofre agora uma interação atrativa (que acelera um átomo contra o outro) do tipo $-C_3/R^3$. Após adquirir energia cinética, o sistema absorve mais um fóton ficando num estado duplamente excitado que ioniza em muito curto alcance; produzindo um molécula de Na_2^+ . Neste trabalho apresentamos um novo experimento no qual o processo de FIA é interrompido pela presença de um terceiro fóton, capaz de levar o sistema a um potencial repulsivo C_3/R^3 , evitando que o par atinja a zona interna onde o segundo fóton poderia ser absorvido. Uma supressão de cerca de 40-50% é observada no processo de FIA. Da mesma maneira que experimentos anteriores demonstraram que

luz pode ser usada como agente para abrir ou amplificar canais de colisões inelásticas, agora estamos demonstrando que luz também pode ser usada para suprimir processos inelásticos. Isto pode vir a ser uma importante técnica para controle de colisões indesejadas envolvendo átomos frios. Resultados experimentais obtidos concordam bem com modelos teóricos em "close-coupling" e semiclassical Landau-Zener. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

DUPLO TRAP: POSSÍVEL UTILIZAÇÃO EM COLISÕES ATÔMICAS

BAGNATO, V. S.; ZÍLIO, S. C.; MARCASSA, L. G.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

BIGELOW, N.

University of Rochester - USA

O Duplo Trap observado em armadilhas magneto-ópticas (duas esferas de átomos ultrafrios separados por uma certa distância) permaneceu por um longo tempo sem explicação. Mais recentemente utilizando a teoria Doppler, que considera o perfil gaussiano dos feixes laser e o desalinhamento dos mesmos em uma estrutura anti-vortex é que foi possível entendê-lo. Neste trabalho inicialmente apresentamos um modelo bidimensional e mostramos qualitativamente a existência de um potencial do tipo de poço duplo separado por uma barreira na direção $x=y$ ou $x=-y$. Em seguida utilizando um modelo tridimensional obtemos um "diagrama de fase"; o qual representa para um dado campo e detuning os domínios onde existe o duplo trap para diferentes condições de intensidade e desalinhamento. Estudamos também o movimento dos átomos para um desalinhamento dependente do tempo. Observamos que devido ao fato dos átomos de cada esfera estarem muito frios, eles são capazes de se moverem acompanhando assim o movimento dos feixes. Como resultado disso temos a colisão entre duas amostras de átomos frios, cuja temperatura final depende "velocidade" de desalinhamento. Isto é muito excitante já que permite o estudo de colisões atômicas em diferentes regimes de temperaturas, desde o quântico até o semi-clássico. Devido a esta característica propomos o uso deste sistema para o estudo de processos colisionais (Ionização Associativa, Redistribuição Radiativa e Mudança de Estrutura Fina) em função da temperatura de colisão. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

ESPECTROSCOPIA DE ESTADOS LIGADOS DE LONGO ALCANCE COM ÁTOMOS SUPERFRIOS

BAGNATO, V. S.; MARCASSA, L. G.; WEINER, J.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Átomos resfriados e aprisionados por laser, constituem um sistema conveniente para estudo de colisões atômicas em um novo regime onde a ocorrência de

emissão espontânea durante o encontro dos átomos não pode ser desprezada. Devido à baixíssima velocidade dos átomos, o estudo de potenciais de longo alcance são dominantes no processo de interação. Utilizando uma armadilha magneto-óptica para átomos de Sódio, obtivemos uma amostra contendo cerca de 10^{10} átomos/cm³ à temperatura de aproximadamente 200μK. Com tais átomos, estudamos o processo de fotoionização associativa no qual $\text{Na} + \text{Na} + \text{fótons} \Rightarrow \text{Na}_2^+ + e^-$. Tal reação química envolve transições para os estados de longo alcance calculados por Stwalley et al. (Phys. Rev. Lett. 41, 1164 (1978)). Nestes potenciais, estados ligados muito próximos do limiar de dissociação são formados mesmo quando a distância entre partículas é cerca de 200 a 300 Å. A formação destes estados (numca antes observados) manifesta-se claramente na formação de Na_2^+ . Assim usando estes ions pudemos obter informação espectroscópica. No sistema experimental lasers são utilizados para excitações. Os estados medidos são comparados com cálculos teóricos mostrando boa concordância, com o estado O_g^- , formado pela interação dipolo-dipolo de dois átomos de Sódio, um no estado excitado e o outro no estado fundamental. Os estudos realizados permitem também observar a importância da interação hiperfina no processo de colisões envolvendo átomos frios. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

ESTRUTURAS EM ANÉIS PARA UM ÁTOMO DE DOIS NÍVEIS EM ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS ASSIMÉTRICAS: MODELO COM TERMO DE SATURAÇÃO MODIFICADO

FARIA, C. F. DE M.; MARCASSA, L. G.; BAGNATO, V. S.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Neste trabalho investigamos, através de simulação numérica, o comportamento de um átomo de dois níveis em uma armadilha magneto-óptica; considerando feixes aprisionantes desalinhados no plano xy formando um quadrado, condição que, para alguns parâmetros externos, origina estruturas em anéis. Introduzimos nas simulações realizadas, diversos tipos de assimetria na armadilha, como desbalanço de intensidade nos feixes aprisionantes, desalinhamentos assimétricos destes feixes em relação ao centro da armadilha, bem como desalinhamentos não paralelos. Isto foi feito com o intuito de verificarmos a influência de imperfeições da montagem experimental; tais como a dissipação da energia dos lasers ou a impossibilidade de obter-se um campo magnético exatamente nulo no centro da armadilha, bem como o fato do desalinhamento entre os feixes aprisionantes não serem exatamente paralelos nas configurações observadas. Utilizando para as forças espontâneas de pressão de radiação exercidas pelos feixes aprisionantes a expressão deduzida por Cook, introdu-

zimos modificações nesta; tal que esta passa a considerar o fato de todos os feixes laser presentes na armadilha contribuem para a saturação da transição de interesse. Esta correção foi adotada recentemente por nosso grupo, mostrando resultados muito próximos aos experimentais. Como resultado, prevemos, utilizando tal modelo para armadilhas assimétricas, distorções nas estruturas em anel semelhantes às observadas em laboratório. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

DIAGRAMA DE FASE: UMA SIMPLES EXPLICAÇÃO DAS DIFERENTES FORMAS ESTRUTURAIS DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA.

GUEDES, I.; ARAUJO, M. T. DE; MILORI, D. M. B. P.; SURDUTOVICH, G. I.; BAGNATO, V. S.; ZILIO, S. C.

IFQSC/USP

Recentemente Bagnato e colaboradores [1] construíram um diagrama de fase que permite, com base nos valores de parâmetros experimentais inerentes à armadilha magneto-óptica, prever que tipo de estrutura espacial deve ser observada bem como o comportamento do raio destas estruturas. Este diagrama foi construído considerando-se apenas a presença da força de vórtice dependente da coordenada radial, como responsável pelo processo de formação das estruturas espaciais.

Neste trabalho utilizaremos o tratamento da referência [1] para explicarmos de forma apenas qualitativa os resultados obtidos por Guedes e colaboradores [2] quando do estudo sistemático do comportamento do raio das estruturas espaciais em função de vários parâmetros experimentais, como por exemplo, gradiente de campo magnético, intensidade do campo de radiação usada para o aprisionamento, dessintonia entre a frequência do campo de aprisionamento e a frequência atômica e desalinhamento dos feixes de laser.

[1] V.S. Bagnato, L.G. Marcassa, M. Oriá, G.I. Surdutovich, R. Vitliña and S.C. Zilio, Phys. Rev. A 48, 3771 (1993).

[2] I. Guedes, M.T. de Araújo, D.M.B.P. Milori, G.I. Surdutovich, V.S. Bagnato and S.C. Zilio, submetido ao J. Opt. Soc. Am. B.

DENSITY EFFECTS FOR COOLED TRAPPED RESONANCE Rb ATOMS.

VITLINA, R. Z.; BAGNATO, V. S.; SURDUTOVICH, G. I.

IFQSC/USP

WEINER, J.

University of Maryland, USA

We demonstrate that with increase of the cooled atoms density the novel collisional process, intermediate between paired and multi-particles ones starts to play a

predominant role even in the conditions when the criterion of the binary collisions is satisfied, i.e. gas parameter $\beta = nf^3 \ll 1$ (n is the trapped atoms density and f is the scattering amplitude of the paired process). This novel process is connected with the influence of the environment (density effects) on the trade of excitations between atoms and is considered on the example of the ^{85}Rb and ^{87}Rb isotopes. The detuning between optical transitions of the Rb isotopes is of the order of a few GHz and for the cooled atoms temperature $\sim 100 \mu\text{K}$ - 1mK the process of excitation trade between atoms during pair collisions has an exponentially small cross section. If excitation one of the hyperfine levels $5P_{1/2}$ of ^{85}Rb is excited atom then the dipole-dipole interaction forms the quasimolecule $^{85}\text{Rb} + ^{85}\text{Rb}^*$. The excited level of ^{87}Rb gets into resonance with the quasimolecular terms and at some point intersects one of them. The probability of the transfer of excitation between quasimolecule ($^{85}\text{Rb} + ^{85}\text{Rb}^*$) and far-distant ^{87}Rb isotope is determined by the Landau-Zener formula. In other words in the vicinity of the atom ^{87}Rb the binary collisions of the atoms ^{85}Rb and $^{85}\text{Rb}^*$ take place and those atoms, which have impact parameter smaller than some critical, excite the atom ^{87}Rb with the Landau-Zener's probability. Then the cross section concept becomes meaningless and the process must be characterized by the excitation relaxation frequency. This frequency is equal to the rate of binary collisions occurring around the atom ^{87}Rb . This effect becomes important for higher than 10^{11} cm^{-3} densities. The work is supported by FAPESP and CNPq.

ESTUDO DO PROCESSO DE CARGA DE ÁTOMOS APRISIONADOS EM MOT COMO FUNÇÃO DA TEMPERATURA.

MILORI, D. M. B. P.; ARAUJO, M. T. DE; GUEDES, I.; ZILIO, S. C.; BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP

Usualmente na literatura o número de átomos aprisionados não é uma função da densidade de átomos de sódio existente no gás de fundo, conseqüentemente não possui uma dependência significativa com a temperatura. Entretanto, esse comportamento não concorda com nossos resultados experimentais. Diante disso, desenvolvemos um modelo teórico onde essa dependência é levada em conta.

Durante o aprisionamento de átomos numa armadilha magneto-óptica existe a competição de dois processos: captura e perdas na armadilha. As perdas são em primeira aproximação devido às colisões entre átomos aprisionados e átomos do gás de fundo dependendo das densidades dos átomos de sódio do gás de fundo, como também da densidade de outras possíveis impurezas que eventualmente existem na célula. A taxa de captura, considerando o vapor como um gás de Boltzmann, tem uma dependência com a temperatura e é uma função

apenas da densidade de átomos de sódio. Neste trabalho vamos apresentar um modelo teórico onde a taxa de captura tem uma dependência com a temperatura do gás de fundo na armadilha.

CARACTERIZAÇÃO DE DOIS ALCALINOS APRISIONADOS SIMULTANEAMENTE EM ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA.

SANTOS, M. S. DOS; FLEMMING, J.; BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP

Atualmente há um grande interesse no estudo de átomos frios. A obtenção de uma amostra densa de átomos frios pode ser usada para estabelecer padrões de frequência, estudos de colisões, efeitos de superfície e efeitos quânticos coletivos como a condensação de Bose-Einstein. No nosso grupo foi feito um estudo sistemático, em vapor de sódio, do comportamento dos átomos na armadilha magneto-óptica, bem como da formação de estruturas espaciais. Tendo em vista já termos conhecimento de como os átomos se comportam na armadilha magneto-óptica, vamos investigar o comportamento dos átomos em uma armadilha dupla. Essa investigação será muito útil no estudo da interação de dois alcalinos lentos, estudo de colisões. Aprisionaremos simultaneamente dois alcalinos distintos, sódio e potássio, e faremos toda a caracterização sistemática da armadilha. Investigaremos por exemplo, como varia o raio da nuvem de átomos de sódio aprisionados na presença de átomos de potássio e compararemos os resultados obtidos com os dados que já conhecemos para aprisionamento de um único alcalino. Tendo feito as comparações, traçaremos um paralelo entre uma armadilha dupla e uma armadilha simples.

APRISIONAMENTO DE ÍONS EM ARMADILHAS TIPO PAUL.

SOUSA, D. M. DE

IFGW/UNICAMP

BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP SÃO CARLOS

No presente trabalho apresentamos a descrição do funcionamento de uma armadilha tipo Paul, ou de RF, para o aprisionamento de íons. Utilizamos a experiência e conhecimento adquiridos no processo de aprisionamento de partículas dielétricas carregadas eletrostaticamente para desenvolver a armadilha de íons.

Com o aprisionamento de íons é possível a realização de estudos em física básica como colisões entre átomos, formação de "clusters", interação entre íons e átomos neutros, espectroscopia de ultra alta resolução, reações químicas, resfriamento a baixas temperaturas, "quantum jumps", estudos em formação de estruturas e outros experimentos.

A disposição dos eletrodos é em forma de um quadrupolo, tal que quando submetidos a potenciais alternados, é criada uma região de mínimo potencial elétrico efetivo no centro da armadilha, possibilitando o aprisionamento dos íons. A armadilha opera com um potencial elétrico oscilatório de 300 V com frequência de oscilação na faixa de 2.5 MHz. A detecção é feita por um circuito eletrônico, que amplifica a corrente produzida pela oscilação dos íons quando estes entram em ressonância com a frequência de operação do amplificador. Os íons são produzidos a partir de um filamento incandescente e acelerados para dentro da armadilha por um potencial contínuo de 50V.

Técnicas experimentais e aplicações utilizando armadilhas de íons vem sendo desenvolvidas rapidamente em poucos anos, e tiveram a sua importância reconhecida por um Premio Nobel em 1989. O principal interesse do aprisionamento de íons é que partículas carregadas podem ser mantidas aprisionadas por longos períodos de tempo, sem os problemas associados ao confinamento de átomos neutros. Pretendemos a seguir realizar o resfriamento dos íons aprisionados por termalização com átomos lentos desacelerados por laser.

First observation of subnatural line widths in $KrM_5N_{2,3}N_{2,3}$ and $XeN_5O_{2,3}O_{2,3}$ resonant Auger spectra

KIVIMÄKI, A.; BRITO, A. N. DE; AKSELA, S.;
AKSELA, H.; SAIRANEN, O.

University of Oulu (Finland) and The Finnish Synchrotron Facility at Max-lab (Sweden)

AUSMEES, A.; OSBORNE, S.; DANTAS, L. B.;
SVENSSON, S.

Uppsala University (Sweden)

The Auger resonant Raman effect is observed for the first time in gas phase atoms in the VUV region, namely, at the $Xe4d \rightarrow 6p$ and $Kr3d \rightarrow 5p$ resonances at 65.11 and at 91.20 eV, respectively [1]. This effect occurs when the band width of the incident radiation is smaller than the life time width of the core excited state. When this condition is fulfilled the line width of the Auger resonant spectra reflects the width of the exciting radiation, also the kinetic energy of the resonant Auger lines presents a linear dispersion when the narrow photon band is scanned over the resonance. The experiments were performed at the new so called Finnish beamline (BL51) at Max-lab, where a short period undulator provides the necessary high intensity radiation monochromatized by a high resolution modified plane grating monochromator [2]. This in combination with an excellent electron energy resolution [3] creates the necessary conditions to measure subnatural total line widths. Utilizing the Auger resonant Raman effect it is possible to enhance the experimental resolution of the resonant Auger spectra and pin point finer details of the electron correlation.

[1] A. Kivimäki, A. Naves de Brito, S. Aksela, H. Aksela, O.-P. Sairanen, A. Ausmees, S. J. Osborne, L. B. Dantas and S. Svensson, *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 4307.

[2] S. Aksela, A. Kivimäki, A. Naves de Brito, O.-P. Sairanen, S. Svensson, and J. Väyrynen, *Rev. Sci. Instrum.*, in press.

[3] S. J. Osborne, A. Ausmees, J. O. Forsell, B. Wannberg, G. Bray, L. B. Dantas, S. Svensson, A. Naves de Brito, A. Kivimäki and S. Aksela, *Synchrotron Radiation News* 7 (1) (1994) 25.

High resolution test measurements of the Modified SX-700 Plane Grating monochromator at the Finnish beamline in Max-lab

AKSELA, S.; KIVIMÄKI, A.
University of Oulu (Finland)

BRITO, A. N. DE

The Finnish Synchrotron Facility at Max-lab (Sweden)

Present institution: University of Brasília

SAIRANEN, O.

Department of Physics University of Oulu (Finland)

SVENSSON, S.

Uppsala university (Sweden)

VÄYRYNEN, J.

University of Turku (Finland)

A new soft x-ray beamline has been constructed and tested at the 550-MeV MAX I synchrotron radiation facility in Lund, Sweden. The beamline is optimized for high resolution gas phase measurements. It uses synchrotron radiation from a narrow gap and short 35-period undulator. The undulator delivers usable radiation in the range 60-600 eV, thus, covering the important C1s, N1s and O1s ionisation regions. The radiation is monochromatized by a modified SX-700 plane grating monochromator with a plane elliptical focusing mirror. A fixed differential pumping station maintains up to five orders of magnitude pressure differences between the experimental and the monochromator chambers. Contamination of the monochromator optical elements is, in this way, avoided when gas phase and "dirty" samples are measured.

The monochromator resolution has been tested recording electron and ion yield spectra from the noble gases Ar and Kr in the resonance excitation just below the Ar $L_{2,3}$ and Kr $M_{4,5}$ edges. The results show that very high resolution $E/\Delta E \approx 10000$ is obtained at 244 eV when shadowing of the optical elements is employed. This resolution is comparable with the best spherical and plane grating monochromators.

[1] H. Ahola and T. Meinander, *Rev. Sci. Instrum.* 63 (1992) 372.

[2] S. Aksela, A. Kivimäki, A. Naves de Brito, O.-P. Sairanen, S. Svensson, and J. Väyrynen, *Rev. Sci. Instrum.*, in press.

First observation of final state dependent anomalous decay ratio in resonant Auger decay of S 2p core excited molecular field split levels in H_2S

BRITO, A. N. DE

The Finnish Synchrotron Facility at Max-lab (Sweden)

Present institution: University of Brasília

SVENSSON, S.; AUSMEES, A.; OSBORNE, S. J.;

BRAY, G.

Uppsala University (Sweden)

SAIRANEN, O.; KIVIMÄKI, A.; NOMMISTE, E.;

AKSELA, H.; AKSELA, S.

Department of Physics University of Oulu (Finland)

Recently a new propensity rule for Auger decay from molecular field split S2p levels was observed in H_2S [1]. The splitting between the " $2p_{3/2}$ " components namely $4e_{1/2}$ and $5e_{1/2}$ was measured to be 110 (5) meV and only decay from the $5e_{1/2}$ was observed. For the first time we observe the same propensity rule also in the Resonant Auger spectrum. Furthermore the anomalous decay ratio from molecular field split S2p is found to be dependent on the symmetry of the final state. The measurements were performed on the so called Finnish beamline at Max-lab, Lund Sweden [2]. This beamline provides high photon flux and resolution which combined with an excellent electron energy resolution gave the necessary condition to record vibrationally resolved resonant Auger spectra of $2p \rightarrow 6a_1$, $2p \rightarrow 3a_2$ S 2p core excited states on H_2S which could then be used to measure precisely the S2p spin-orbit splitting using resonant Auger spectroscopy.

[1] S. Svensson, A. Ausmees, S. J. Osborne, G. Bray, F. Gel'mukhanov, H. Ågren, A. Naves de Brito, O.-P. Sairanen, A. Kivimäki, E. Nömmiste, H. Aksela and S. Aksela. submitted for publication in Phys. Rev. Lett.

[2] S. Aksela, A. Kivimäki, A. Naves de Brito, O.-P. Sairanen, S. Svensson, and J. Väyrynen, Rev. Sci. Instrum., in press.

ESPECTROSCOPIA A TRANSFORMADA DE FOURIER E A LASER A DIODO DO MODO C-O STRETCHING DO $^{13}CH_3OH$

MORAES, J. C. S.

Unesp-Ilha Solteira

PEREIRA, D.; CRUZ, F. C. DA; SCALABRIN, A.

DEQ-Unicamp

Estamos realizando um estudo sistemático de "assignment" (identificação dos números quânticos envolvidos numa transição) de espectros a Transformada de Fourier, a alta resolução, de absorção da espécie isotópica $^{13}CH_3OH$, na região Infra-vermelho (IV) e Infra-vermelho Longínquo (IVL). Associado a este estudo, apresentamos aqui um espectro a Transformada de Fourier do modo C-O stretching da molécula $^{13}CH_3OH$, com resolução 0.12 cm^{-1} , e espectros limitados Doppler, obtidos com laser a Diodo continuamente

sintonizáveis. Uma análise destes espectros, juntamente com dados associados a linhas laser IVL, previamente conhecidas, e parâmetros moleculares, permitiu-nos determinar o número quântico momento angular J dos multipletos dos ramos P e R do modo torcional fundamental ($n=0$). Além disso, foi possível determinar transições da molécula em boa coincidência com linhas de emissão do laser CO_2 regular e de alguns isótopos. Os resultados obtidos auxiliaram futuros trabalhos de "assignment" de linhas laser IVL da molécula e poderão também serem utilizados na procura de novas linhas laser IVL através do bombeamento óptico da molécula. Apoio Fianciero: FAPESP e CNPq.

ATOM IN A Q-ANALOG HARMONIC OSCILLATOR TRAP

SHARMA, S. S.; SHARMA, N. K.

Universidade Estadual de Londrina, Londrina, Cep

86051-970, Pr, Brasil

The dynamics of a two-level atom confined to a q-analog harmonic oscillator trap and interacting with a single-mode classical travelling laser light field is investigated. In the Lamb Dicke regime the model is analogous to q-analog of Jaynes-Cumming model with center of mass motion quanta playing a role similar to that of the quantized radiation field. In the initial state the atom is assumed to be in the ground state with its center of mass motion represented by a q-analog Glauber Coherent state. The q-deformation is seen to modify the quantum collapse and revival patterns. We analyse the q-deformation parameter dependence of the time interval between successive collapses and revivals for real as well as complex valued deformations.

Bichromatic Laser cooling in a three-level System

GUPTA, R.; XIE, C.; PÁDUA†, S.; BATELAAN, H.; METCALF, H.

State Univ. of N. York at Stony Brook

We report a 1D study of optical forces on atoms in a two-frequency laser field. Our new scheme employs two standing waves with the same linear polarization but different laser frequencies. The light couples two ground state hyperfine structure levels to a common excited state of ^{85}Rb , thus forming a Λ system. We observe a new type of sub-Doppler cooling with blue-tuned light that uses neither polarization gradients nor magnetic fields, efficient heating with red tuning, and the spatial phase dependence of these. We observed deflection from a rectified dipole force and determined its velocity dependence and capture range. A simplified semiclassical calculation agrees qualitatively with our measurements. This new scheme provides a better insight into particular interpretations of sub-Doppler

laser cooling such as the Sisyphus picture.
Supported by NSF, AFOSR, and CAPES†.
(†) Present address: Departamento de Física - UFMG.

**DIAGNÓSTICO DE DESCARGAS
ELÉTRICAS POR ESPECTROMETRIA DE
MASSA ACOPLADA A ESPECTROSCOPIA
DE EMISSÃO**

EGERT, P.

Bolsista de mestrado/CNPq

SPELLER, C. V.; SOUZA, A. R. DE
Depto de Física-UFSC

A utilização de plasmas em processos de tratamento de superfícies metálicas é de grande interesse industrial. Entretanto, quando se visa a viabilização de sua aplicação de forma otimizada, a determinação da composição química do plasma apresenta-se como um dos problemas fundamentais. Neste trabalho, apresentamos as características do experimento destinado a este fim, com ênfase na técnica de espectrometria de massa. Utilizamos um espectrômetro de massa do tipo quadrupolo (VG-SXP Elite 600), acoplado a um reator de nitretação por plasma através de um orifício. Através dele, podem ser identificadas e quantificadas (concentrações relativas) as diversas espécies químicas, bem como as funções de distribuições de energia associadas às espécies iônicas presentes no meio ionizado. A primeira etapa está sendo dedicada ao estudo da influência do oxigênio na evolução de espécies neutras em misturas $N_2 - H_2 - O_2$, as quais deverão ser correlacionadas aos resultados obtidos por espectroscopia óptica no mesmo reator e com as propriedades das camadas formadas no substrato. Além da formação de NO e compostos hidrogenados, os resultados mostram claramente que a presença de impurezas no meio, tais como O_2 , mas também CO_2 e H_2O , podem influir de maneira significativa na composição química do plasma e nas características das camadas formadas sobre o substrato. Esta primeira etapa deverá permitir a caracterização definitiva da técnica antes de passar-se ao estudo das espécies iônicas.

**PROPRIEDADES ÓPTICAS DO
 $MgGa_2O_4 : Co^{2+}$ e do $ZnGa_2O_4 : Co^{2+}$**

SOSMAN, L. P.; ABRITTA, T.

Instituto de Física - UFRJ

PEREIRA, A. C.; VARGAS, H.

Instituto de Física - UNICAMP

O galato de magnésio e o galato de zinco são compostos do tipo espinel, pertencentes ao grupo espacial $Fd3m$. Os espectros de fluorescência do $MgGa_2O_4 : Co^{2+}$ e do $ZnGa_2O_4 : Co^{2+}$ mostram uma intensa banda no visível devida à transição eletrônica ${}^4T_1({}^4P) \rightarrow {}^4A_2({}^4F)$ e uma fraca banda na região do infravermelho atribuída à transição ${}^4T_1({}^4P) \rightarrow {}^4T_2({}^4F)$ do íon Co^{2+} tetraedricamente coordenado. Estas bandas apresentam tempos de decaimento de $4\mu s$ para o $MgGa_2O_4 : Co^{2+}$ e $1\mu s$ para o $ZnGa_2O_4 : Co^{2+}$, que permanecem constantes entre $77K$ e $296K$. Os espectros de excitação da fluorescência e de absorção fotoacústica exibem bandas associadas à transição eletrônica ${}^4A_2({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4P)$ do Co^{2+} em sítio tetraédrico. A dependência da amplitude do sinal fotoacústico com o inverso da frequência de modulação mostra que o sinal é gerado principalmente pela expansão térmica das amostras. Os valores obtidos para o tempo de relaxação não radiativo do $MgGa_2O_4 : Co^{2+}$ e do $ZnGa_2O_4 : Co^{2+}$ foram, respectivamente, $7ms$ e $9ms$. A comparação entre os tempos de relaxação não radiativos observados pela espectroscopia fotoacústica e os tempos de decaimento das bandas fluorescentes indica que os processos radiativos são dominantes nestes compostos.

*Workshop: Colisões de Elétrons e Íons
com Átomos e Moléculas (ATO) -
10/06/94*

INTERAÇÃO ELÉTRON-MOLÉCULA: ONDE ESTAMOS? PARA ONDE IREMOS?

MU-TAO, L.

Depto. de Química, Universidade Federal de São Carlos, C.P. 376, 13565-905 São Carlos, SP

Nos últimos dez anos houve no país um desenvolvimento significativo tanto qualitativa quanto quantitativamente, em relação aos estudos teóricos e experimentais de interações de elétrons com átomos e moléculas em fase gasosa. Existem atualmente vários grupos consolidados com participação, além de pesquisadores, de alunos de graduação e pós-graduação. Particularmente em São Carlos, as atividades de pesquisa nesta área se dão nas partes teóricas e experimentais. Nos estudos experimentais, as principais atividades são estudos de processos de interação elástica e de excitação e dissociação de moléculas nas faixas de energia incidente correspondentes à região de UV próximo e de vácuo. Foram medidas seções de choque total e elástica diferencial absolutas, medidas de espectros de perda de energia de alta resolução. Uma característica importante é que as aparelhagens utilizadas são inteiramente desenvolvidas pelo grupo. Nos estudos teóricos, esforços foram concentrados em duas frentes principais. A primeira

é a aplicação de métodos já existentes para cálculos de seções de choque de espalhamento elástico e inelástico da interação elétron-molécula assim como dos parâmetros de correlação e alinhamento dos estados excitados de moléculas. São utilizados nesses estudos teóricos os métodos variacional iterativo de Schwinger e de ondas distorcidas. A segunda linha refere-se ao desenvolvimento de um formalismo teórico de caráter multicanal e de códigos computacionais para o estudo da interação de elétrons e pósitrons com átomos e moléculas. Nestes estudos, os primeiros resultados para o espalhamento $e^+ - H$ já foram obtidos e são bastante encorajadores. Serão mostrados no Encontro exemplos ilustrativos dos desenvolvimentos mencionados. Também serão apresentadas as pesquisas efetuadas por outros grupos ativos na área no estado de São Paulo. Finalmente, serão discutidos e sugeridos problemas de interesse tanto teórico como experimental, bem como as perspectivas nesta área.

FRAGMENTAÇÃO DE MOLÉCULAS INDUZIDAS PELA EXCITAÇÃO DE ELÉTRONS DE CAMADAS INTERNAS: EMPREGO DE FEIXES DE ELÉTRONS E LUZ SÍNCROTRON

SOUZA, G. G. B. DE

Depto. de Físico-Química, Instituto de Química, UFRJ

A excitação de elétrons de camadas internas em moléculas traz como decorrência a formação de estados iônicos de carga dupla ou múltipla, muitas vezes instáveis e que se fragmentam rapidamente. Em nosso laboratório a caracterização dos estados excitados associados com elétrons de camadas internas em moléculas tem sido efetuada através do emprego da Espectroscopia de Perda de Energia de Elétrons, que permite tanto a determinação das energias quanto das seções de choque de excitação. Um outro aspecto importante desta técnica reside na possibilidade de observação de processos de excitação proibidos por regras de seleção do tipo dipolo elétrico. A análise da fragmentação molecular associada com estes processos tem sido efetuada através do emprego de um espectrometro de massas do tipo Tempo-de-Voo, projetado e construído em nosso laboratório. Paralelamente temos efetuado medidas de espectros de massas e de coincidência íon-íon usando luz síncrotron (Laboratório LURE, Orsay, França). O emprego desta fonte de luz, de alta intensidade e de energia sintonizável, permite o acesso seletivo a estados excitados e a consequente análise dos processos de fragmentação. No decorrer de nossa participação serão apresentados aspectos experimentais associados com as diferentes técnicas mencionadas e apresentados resultados recentes obtidos tanto com o emprego de feixes de elétrons quanto com a luz síncrotron.

Íons Atômicos e Moleculares

FARIA, N. V. DE C.

Instituto de Física - UFRJ

Íons simples de carga simples ou múltipla e íons moleculares são interessantes objetos de estudo. São usados para testar conceitos fundamentais de eletrodinâmica quântica, são componentes de plasmas de diversos tipos, tais como aqueles encontrados em atmosferas estelares, dispositivos de fusão nuclear, etc. Feixes destes íons são obtidos para diferentes velocidades e, colisões binárias com átomos, moléculas, elétrons e outros íons podem ser assim estudados. No Brasil, a Física Atômica com íons atômicos e moleculares tem sido realizada essencialmente no Laboratório F. X. Roser da PUC-Rio. Os projéteis utilizados têm velocidades da ordem da unidade atômica ($v_0 = \text{vel. Bohr}$) e são essencialmente H^+ , H_2^+ , H_3^+ , He^+ e He^{2+} . Alguns trabalhos foram realizados também com íons mais pesados e mais lentos, como C^{+q} e O^{+q} e íons menos comuns, H^- e HeH^+ . Há projetos para utilização de íons multicarregados a baixas e muito altas velocidades que serão discutidos no workshop. Na apresentação será descrito o estado atual da pesquisa em colisões de íons no Brasil e no mundo.

Espalhamento e Colisões (ATO) – 10/06/94

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS DE BAIXA ENERGIA POR CF_4 , CCl_4 , $SiCl_4$, $SiBr_4$ e SiI_4

POLICASTRO, A. P.; FERREIRA, L. G.; LIMA, M. A. P.

Universidade Estadual de Campinas

BETTEGA, M. H. F.

Universidade Federal do Paraná

Cálculos de seções de choque para o espalhamento de elétrons por moléculas têm sido limitados a alvos com poucos elétrons. Neste trabalho, mostramos, através de algumas aplicações, que a utilização de pseudopotenciais suaves (e "norm-conserving") na descrição do alvo e nos cálculos de espalhamento torna possível o estudo do espalhamento de elétrons de baixa energia por moléculas com muitos elétrons. As moléculas estudadas foram: CF_4 , CCl_4 , $SiCl_4$, $SiBr_4$, and SiI_4 , que contêm 42, 74, 82, 154, e 226 elétrons, respectivamente. Os pseudopotenciais substituem o núcleo e os elétrons de caroço de cada átomo de modo que apenas a valência é descrita por uma teoria de muitos corpos. Nossos resultados concordam qualitativamente com os dados experimentais disponíveis. Exceto para o CF_4 , mostramos seções de choque teóricas para essas moléculas pela primeira vez. Nossos resultados para o CF_4 estão em excelente acordo com o único dado teórico disponível na literatura, que é um cálculo com todos os elétrons. Para essa mesma molécula, nossas seções de choque diferenciais também concordam de maneira excelente com os dados experimentais.

Z_{eff} de acordo com o Método Multicanal de Schwinger no espalhamento de pósitrons de baixa energia.

SILVA, E. P. DA

Universidade Federal do Ceará.

GERMANO, J. S. E.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica.

LIMA, M. A. P.

Unicamp

Calculamos pela primeira vez o parâmetro Z_{eff} de anti-quilização pósitronio, em ambientes moleculares, a partir da função de onda de $(N+1)$ partículas, advinda do Método Multicanal de Schwinger para pósitrons de baixa energia. Este cálculo é completamente *ab initio* no sentido dado pela Química Quântica. Nossos resultados, 3,9 e 13,63, para o espalhamento de pósitrons contra átomos de He e moléculas de H_2 , respectivamente, estão em excelente concordância com os dados

experimentais (3,94 e 14,7) à temperaturas térmicas (próximas de 0,025eV). Nosso programa está limitado à funções do tipo s e p. Estes resultados animadores nos estimulam a calcular Z_{eff} para moléculas maiores, tais como CH_4 e C_2H_4 . Estas moléculas são de grande interesse do ponto de vista experimental, no espalhamento de pósitrons de baixa energia. No entanto, representam um grande desafio computacional.

MECANISMOS DE PRODUÇÃO DE ESTADOS METAESTÁVEIS EM UM FEIXE DE CÁLCIO

GOMIDE, J. V. B.; PAIXÃO, F. J.; GARCIA, G. DE A.; PEREIRA, D.; SCALABRIN, A.

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp, CEP

13081-970, Campinas, SP, Brasil

Recentemente construímos um sistema de feixe atômico que permite a produção de átomos em estados metaestáveis. No momento estamos operando com o cálcio, e a descarga elétrica na saída do forno, de onde os átomos efundem, excita cerca de 30% do feixe para o primeiro tripleto metaestável $4s4p^3P$. Para o cálcio, o singlete $4s3d^1D_2$ também é metaestável e está presente no feixe atômico. Obtivemos os espectros de emissão da região da descarga elétrica para diversas condições de tensão e corrente entre o catodo e o anodo. Estes espectros, feitos inicialmente com um espectrômetro com duas grades de difração e posteriormente com um OMA, são os primeiros a serem realizados até o momento, não havendo nenhuma referência na literatura. Utilizamos o programa Multiconfiguration Hartree-Fock para determinar quais os mecanismos envolvidos na produção dos níveis metaestáveis. Os processos de excitação envolvidos são os de colisão elétron-átomo e o decaimento por cascata dos estados mais energéticos. Os resultados obtidos permitem a compreensão do papel desempenhado pelos diversos processos envolvidos na produção dos níveis metaestáveis. Isto possibilitará a construção de descargas elétricas com características para excitar o nível metaestável desejado com melhor desempenho.

CÁLCULOS CLÁSSICOS DO PODER DE FREAMENTO ELETRÔNICO

GRANDE, P. L.

UFRGS

SCHWIETZ, G.

Hahn-Meitner Institut, Berlin

O poder de freamento eletrônico para partículas and anti-partículas ($Z_p = \pm 1, \pm 2, \pm 3$) incidentes em hidrogênio atômico foi calculado usando-se descrições completamente clássicas e quânticas para cada processo específico de perda de energia (ionização, excitação

e captura eletrônica). Com esse objetivo, utilizou-se o método Monte Carlo para Trajetórias Clássicas (CTMC) e de canais acoplados do tipo Orbital Atômico (AO) a fim de se obter as seções de choque de freamento a nível clássico e quântico. Uma comparação entre estes dois tipos de cálculos indica que os resultados clássicos convergem para os resultados quânticos no limite de forte perturbação do projétil ($Z_p/v_p \gg 1$, v_p é a velocidade do projétil). A região de energia de aplicabilidade da prescrição clássica para a perda de energia corresponde ao pico do poder de freamento eletrônico onde somente métodos não perturbativos podem produzir resultados realistas. O papel da captura eletrônica, efeitos de polarização, distorção e de variações nos cálculos clássicos, como a influência de restrições na transferência de energia, também são analisados.

DESTRUIÇÃO DE MOLÉCULAS E ÍONS MOLECULARES RÁPIDOS DE HIDROGÊNIO INDUZIDA POR COLISÕES COM ÁTOMOS DE GASES NOBRES

BORGES JR, I.; JALBERT, G.; COELHO, L. F. DE S.; CASTRO-FARIA, N. V. DE
IF-UFRJ

São apresentados resultados experimentais das seções de choque de destruição do íon molecular H_2^+ e da molécula H_2 , incidindo nos gases nobres He, Ne e Ar, com velocidades entre 3,0 e 7,0 unidades atômicas. Utilizando também resultados experimentais anteriores^[1] de dissociação do H_3^+ nos mesmos gases e a mesmas velocidades, todos os resultados são analisados segundo um modelo simples de dissociação molecular. Este modelo, em analogia com modelo conhecido de ionização de íons atômicos e átomos, considera o elétron ativo do projétil molecular como sendo representado por uma função de onda "livre" (aproximação de Born de ondas planas). No processo de destruição do projétil molecular, o átomo alvo transfere momento linear correspondente a uma energia suficiente para levar a molécula do estado eletrônico fundamental para um estado dissociativo ou ionizado. As seções de choque de destruição σ_D , segundo este modelo, apresentam a dependência $\sigma_D = (n/I)f(v, Z)$ onde n é o número de elétrons, E a energia e I é a energia para dissociar o projétil incidente e $f(v, Z)$ é uma função da velocidade v do projétil e do número atômico Z do átomo alvo. O modelo se mostrou apropriado para descrever quantitativamente as princi-

pais características da destruição.

[1] - W. Wolff, L.F.S. Coelho, H. E. Wolf e N. V. de Castro Faria, Phys. Rev. A45, 2978 (1992).

ATIVIDADES DE PESQUISA NA LINHA DE COLISÕES ATÔMICAS DO LABORATÓRIO VAN DE GRAAFF DA PUC-RIO

SIGAUD, G. M.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Em colisões entre íons multi-carregados e átomos há, em geral, uma grande multiplicidade de processos dando origem à ionização de pelo menos um dos parceiros da colisão. Na grande maioria dos casos, é impossível separar univocamente estes processos por meio de medidas de seções de choque totais, sendo necessárias medidas simultâneas de alguns dos produtos da colisão, utilizando técnicas de coincidência. O grupo de Colisões Atômicas do Laboratório do Acelerador Van de Graaff da PUC-Rio tem concentrado seus esforços no sentido de entender o papel das correlações dinâmicas em alguns destes processos. Com este objetivo, foram realizadas medidas dos estados de carga emergentes em coincidência com os íons de recuo em colisões entre He, com energias entre 1,5 e 4,0 MeV, e H_2 e He, logrando separar, pela primeira vez, os efeitos de "screening" e "antiscreening" (perdas devidas às interações elétron-núcleo e elétron-elétron, respectivamente). Além disso, foram medidas as seções de choque totais de captura e ionização de elétrons 2s de íons com três elétrons (C^{3+} e O^{5+}), com energia entre 1,0 e 4,0 MeV, colidindo com H_2 e He. Foi observado um forte acoplamento entre os canais de perda, captura e ionização do átomo-alvo, nesta região de velocidades intermediárias. As contribuições relativas destes canais são significativamente alteradas se o alvo possuir apenas um elétron. A linha dispõe de um forno para produção de Hidrogênio atômico "on line", por ser este o sistema de um elétron mais simples. Medidas da dependência dos processos de troca de carga com o parâmetro de impacto são também possíveis utilizando um sistema bidimensional de detecção de partículas, cujo elemento principal é uma microchannelplate "image quality". Finalmente, está sendo instalado um espectrômetro de elétrons em uma nova câmara de espalhamento, montada em série com a atual, podendo se acoplar com qualquer um dos sistemas de detecção existentes, e abrindo novas perspectivas para estudos ainda mais detalhados.

Física Atômica e Molecular III (ATO)
 - 10/06/94

**SECÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL
 ELÁSTICA ABSOLUTA PARA ELÉTRONS
 (100-1000 eV) ESPALHADOS POR**

HIDROCARBONETOS: C₂H₂ E C₂H₄

NOGUEIRA, J. C.; ESCHIAPATI-FERREIRA, M. A.;

SANTOS, C. DOS

Depto. de Química, UFSCar

DALLAVALLI, M. J.

Depto. de Engenharia Química, UFPR

BARBIERI, R. S.

Depto. de Física, UFSCar

Através deste trabalho reportamos as primeiras medidas absolutas de Secção de Choque Diferencial Elástica (SCDE) para o espalhamento de elétrons por moléculas de C₂H₂ e C₂H₄. Para tal, elétrons de energia intermediária (100, 200, 300, 400, 500, 800, 10000 eV) foram utilizados, tendo as medidas sido efetuadas em ângulos de espalhamento na faixa de 10 a 120 graus. A aparelhagem utilizada é basicamente a mesma descrita na literatura por Iga e cols.[1]. Os valores absolutos de SCDE para os hidrocarbonetos foram obtidos através da Técnica de Fluxo Relativo[2]. Valores absolutos de SCDE para o gás nitrogênio de outros autores[3] foram considerados já que o gás foi utilizado como padrão secundário. Os nossos resultados serão comparativamente apresentados aos dados experimentais de Fink e cols.[4]. Os resultados para o C₂H₂ serão também comparados aos dados teóricos de Mu-Tao e cols.[5]. Os dados reportados na ref.4 para elétrons de 100, 200, 400, 600 e 1000 eV foram obtidos através de normalizações, a 90 graus, de medidas relativas com dados fornecidos pelo Modelo dos Átomos Independentes.

[1] I. Iga, Lee Mu-Tao, J.C. Nogueira R.S. Barbieri, J. Phys. B 20, 1095 (1987)

[2] S.K. Srivastava, A. Chutjan S. Trajmar, J. Chem. Phys. 63,405(1979); J.C. Nickel, P.W. Zetner, G. Shen S. Trajmar, J. Phys. E 22,730(1989)

[3] R. D. DuBois, M.E. Rudd, J. Phys. B 15,2657(1978)

[4] M. Fink, K.Jost, D. Herrman, J. Chem. Phys. 63,1975(1975)

[5] Lee Mu-Tao, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, L. E. Machado E. P. Leal, J. Phys. B23,4331(1990)

**IONIZAÇÃO DE ÍONS
 MULTICARREGADOS POR IMPACTO DE
 ELÉTRONS UTILIZANDO A TÉCNICA DE
 CANALIZAÇÃO**

DONANGELO, R.; JALBERT, G.; CASTRO-FARIA, N.

V. DE

IF-UFRJ

AZEVEDO, G. DE M.

DF- PUC/RIO

Em trabalhos recentes foi demonstrada a possibilidade de se estudar captura eletrônica radiativa e ionização de íons multicarregados por impacto de elétrons utilizando a técnica de canalização. O experimento consiste em se enviar um íon de carga q velocidade v sobre um canal particular de um cristal e observar os diferentes íons de carga q' que são transmitidos. Na análise de dados interpreta-se a colisão de íons com elétrons do meio provocando mudança de carga, principalmente em condições de hipercanalização, como equivalente a um feixe intenso de elétrons incidindo sobre o íon. Cálculos de seções de choque de ionização utilizando esta interpretação necessitam de uma modelagem correta da situação física que inclui o conhecimento das equipotenciais do canal, da densidade eletrônica local e consequente trajetória dos íons. Nos cálculos realizados até o momento somente valores médios destas grandezas foram considerados. Nós estamos refazendo estes cálculos utilizando uma descrição mais detalhada e completa da situação física. Para isto desenvolvemos um programa de computador para estudo da dinâmica do íon em situação de canalização e outro de simulação de perda de elétron (Monte Carlo).

**O FUNCIONAL - \tilde{C} : UM MÉTODO
 EFICIENTE PARA CALCULAR SEÇÕES DE
 CHOQUE DE MOLÉCULAS EM
 ESPALHAMENTO DE PÓSITRONS**

LINO, J. L. DA S.; GERMANO, J. S. E.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

LIMA, M. A. P.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Neste trabalho apresentamos uma versão do método variacional conhecido por Funcional- \tilde{C} (Takatsuka and McKoy, Phys. Rev. A30,3976 (1984)) aplicável ao espalhamento de pósitron por moléculas de geometria arbitrária. Este método foi inicialmente desenvolvido para o espalhamento de elétrons e sua implementação estava restrita à moléculas de simetria cilíndrica. A versão atual foi desenvolvida para um tratamento mais adequado do espalhamento de pósitrons, quando as moléculas envolvidas no processo de colisão possuem um potencial de longo alcance. Além das moléculas polares, este método também pode efetuar cálculos mais

precisos de excitações eletrônicas envolvendo transições permitidas por dipolo. A presente versão do Funcional- \tilde{C} , é na verdade uma extensão do Método Multicanal de Schwinger para Pósitrons (SMCP)[Germano and Lima, Phys.Rev.A47,3976(1993)] que comporta-se de maneira eficaz para potenciais de curto alcance. Esse formalismo, além do SMCP, utiliza os dois primeiros termos da série de Born que são adequados para tratar problemas de espalhamento em regiões onde o potencial é de longo alcance. Seções de choque elásticas por impacto de pósitrons e elétrons calculadas a partir dos termos de Born (isoladamente) são apresentadas para os sistemas He, H₂ e o H₂O. Para o funcional- \tilde{C} , apresentamos seções de choque elásticas preliminares para os sistemas $e^+ - \text{He}$ e $e^+ - \text{H}_2$.

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO MULTICANAL DE SCHWINGER NO ESTUDO DO ESPALHAMENTO DE PÓSITRONS e ELÉTRONS POR MOLÉCULAS POLIATÔMICAS POLARES: APLICAÇÕES PARA O H₂O e CH₂O.

GERMANO, J. S. E.; LINO, J. L. DA S.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

LIMA, M. A. P.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Neste trabalho apresentaremos cálculos de seções de choque elásticas total e diferencial para o espalhamento de pósitrons e elétrons pelas moléculas de H₂O e CH₂O, onde a energia da partícula incidente variou de 2 a 20 eV. Esses cálculos foram obtidos utilizando o Método Multicanal de Schwinger para Elétrons (MMSE) e para Pósitrons (MMSP). Essas seções de choque foram calculadas a partir de amplitudes de espalhamento de núcleos fixos, de maneira que para baixas componentes do momento angular nós utilizamos o MMSE (MMSP) e para as grandes componentes do momento angular foi feito um tratamento utilizando o primeiro termo de Born. Obtivemos boas concordâncias com outros resultados teóricos e experimentais para o sistema $e^- - \text{H}_2\text{O}$ existente na literatura. Discutiremos também algumas similaridades e diferenças existentes no espalhamento de pósitrons e elétrons para as moléculas de H₂O e CH₂O.

DISTRIBUIÇÃO DE VELOCIDADE E EFICIÊNCIA DE PRODUÇÃO DE UM FEIXE METAESTÁVEL DE CÁLCIO

GOMIDE, J. V. B.; GARCIA, G. DE A.; PEREIRA,

D.; SCALABRIN, A.

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp

Neste trabalho relatamos as medidas de caracterização de um feixe atômico metaestável de cálcio. No nosso sistema de feixe atômico, os átomos efundem de um forno a 700° C e, logo na saída do forno, são excitados

por uma descarga elétrica. A descarga, longitudinal ao feixe atômico, excita os átomos por colisões elétron-átomo. Ela é constituída basicamente por um catodo na forma de um toróide, colocado próximo à boca do forno, e do anodo, que é uma estrutura anular dupla, que fica a 1 cm do catodo. Na região entre o catodo e o anodo é aplicado um campo magnético que faz com que os elétrons realizem trajetórias afuniladas, aumentando a eficiência das colisões entre os elétrons e os átomos. Incidimos o laser perpendicularmente ao feixe atômico, 40 cm depois da descarga elétrica, variando o seu comprimento de onda em torno às transições $4s4p^3P_{0,1,2} - 4s5s^3S_1$. Através da intensidade da absorção chegamos ao valor da eficiência da descarga elétrica para produzir o tripleto metaestável 3P . No nosso caso, 30% dos átomos que saem do forno são excitados para $4s4p^3P$. A distribuição de velocidade dos átomos no feixe é obtida incidindo o laser perpendicularmente e paralelamente ao feixe atômico, variando o comprimento de onda em torno a 612 nm, correspondente à transição $^3P_1 - ^3S_1$. Coletando a fluorescência no ponto onde os dois lasers se interceptam, obtemos a curva de distribuição de velocidade. Ela é diferente da distribuição maxwelliana devido às colisões que ocorrem na região da descarga.

Stopping Powers and Charge Equilibration Process for He Ions Through $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ Direction of Si Crystals.

SANTOS, J. H. R. DOS; GRANDE, P. L.; BOUDINOV, H.; BEHAR, M.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

This contribution presents measurements and theoretical calculations for the stopping powers of He⁺⁺ ions through $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ Si crystals directions with energies ranging between 380 and 760 keV. In addition we report results on the charge equilibration process of He⁺ and He⁺⁺ ions at 380 keV channelled through the same major directions. For this sake we have used three sets of SIMOX samples consisting in a $\langle 100 \rangle$ Si wafer. The measurements were carried out using the Rutherford technique in a backscattering geometry. This method despite several drawbacks provide us with the advantage of being independent of the thickness determination of the Si film. The results of the present experiments show that the ratio between the $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ channelled stopping powers and the corresponding random stopping power $\frac{S_{\langle 100 \rangle}^c}{S_R^c}$ and $\frac{S_{\langle 110 \rangle}^c}{S_R^c}$ respectively are a function of the energy, reaching the maximum for both cases at around 380 keV. At this energy the $\frac{S_{\langle 100 \rangle}^c}{S_R^c}$ ratio is ~ 0.97 while the $\frac{S_{\langle 110 \rangle}^c}{S_R^c}$ ratio is ~ 0.9 . First order Born calculations of the mean energy loss depending on the impact parameter were performed to estimate the electronic energy loss under channelled condition. Preliminary results

show a fairly good agreement with the present experimental data. The charge exchange experiments were performed with He^+ and He^{++} ions at 380 keV using the Rutherford backscattering technique in the $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ channelled directions. For this energy the difference in the SiO_2 front edge positions as determined with the He^+ and He^{++} ions give us a direct information on the difference in the He^+ and He^{++} effective stopping powers and hence on the equilibration distance for these ions. The results of the present experiment show that for the $\langle 100 \rangle$ direction the charge equilibration process occurs in less than 2 nm. On the other side we were unable to fix an upper limit for the above mentioned distance for the $\langle 110 \rangle$ direction.

ESTUDO DE ESTRUTURAS EM SEÇÕES DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS.

SARTORI, C. S.; LIMA, M. A. P.
UNICAMP

Analisando seções de choque de espalhamento de elétrons por moléculas, através do método multicanal de Schwinger (SMC), foram verificadas estruturas na região entre 13-18 eV para a molécula de H_2 e entre 5.7-6.4 eV para a molécula de CH_2O . Algumas dessas estruturas foram atribuídas a indeterminações de ordem numérica que podem ocorrer no método multicanal de Schwinger, através da análise dos operadores presentes na equação de Lippmann-Schwinger. Outras, de natureza física - proveniente do acoplamento multicanal em questão - foram atribuídas a estados ligados da hamiltoniana global do sistema (alvo + elétron). Apresentaremos os dois tipos de estrutura e formas de retirar aquelas que forem expúrias.

ALINHAMENTO E ORIENTAÇÃO NA COLISÃO DE ELÉTRONS COM O ÁTOMO DE SÓDIO.

DINIZ, R. B.; PAIXÃO, F. J. DA
UNICAMP

Nos últimos 20 anos as experiências de coincidência elétrons-fóton revelaram aspectos novos sobre o processo de colisão entre elétrons e átomos. A determinação destas novas grandezas, denominadas de parâmetros de alinhamento e orientação, permite obter informações sobre a matriz densidade do estado criado pela colisão. Neste trabalho apresentaremos resultados teóricos para estes parâmetros para as transições $3^2S \rightarrow 3^2P$, $3^2S \rightarrow 3^2D$ e $3^2D \rightarrow 3^2P$ do átomo de sódio para energias do elétron incidente menores que 10 eV. Esta escolha foi motivada pelos resultados experimentais existentes e pouco explorados por cálculos teóricos. Para as transições que envolvem o estado 3^2D não existem resultados teóricos presentes na literatura.

As amplitudes de espalhamento serão calculadas a partir de um cálculo de canais acoplados que inclui os estados 3^2S , 3^2P , 3^2D , 4^2S , 4^2P , 4^2D e o 4^2D do sódio e consideramos os elétrons $1s$, $2s$, $2p$ como inertes representados por potencial Thomas-Fermi mais a sua polarização.

ESTUDO DA EXCITAÇÃO $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$ DE H_2 POR IMPACTO DE ELÉTRONS UTILIZANDO O MÉTODO DE ONDAS DISTORCIDAS: A INFLUÊNCIA DAS FUNÇÕES DE BASE NAS SEÇÕES DE CHOQUE

MU-TAO, L.; FUJIMOTO, M. M.; MACHADO, L. E.
UFSCar
MICHELIN, S. E.
UFSC
BRESCANSIN, L. M.
Unicamp

O método de ondas distorcidas (MOD) tem sido largamente utilizada para o cálculo de seções de choque de excitação atômica e molecular por impacto de elétrons. Apesar da sua simplicidade, foi verificado que o MOD é essencialmente equivalente ao método de Schwinger multicanal a nível de dois estados e tem produzido resultados confiáveis principalmente para as transições opticamente permitidas. (transições dipolares). Entretanto, para a transição $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$ do H_2 , estudos teóricos anteriores empregaram diversos métodos (aproximação de Born^a, MOD^b, método de close-coupling a dois estados^c e verificaram que apesar de as seções de choque integrais calculadas concordarem entre si, todos os métodos superestimam as seções de choque por um fator de aproximadamente dois, mesmo para energias do elétron incidente até 50eV. No presente trabalho re-estudamos esta excitação do H_2 pelo MOD, utilizando dois conjuntos de funções de base para representar tanto o estado fundamental como o estado excitado do alvo. Utilizando a mesma base, nosso cálculo reproduziu as mesmas seções de choque dos estudos anteriores. Entretanto, com uma base que contem funções mais difusas, os novos resultados são aproximadamente 1.8 vezes menores e mostram uma boa concordância com resultados experimentais. Os resultados de seções de choque diferenciais e integrais, assim como detalhes da discussão serão apresentados no Encontro.

Apoio: CNPq, FINEP-PADCT, FAPESP.

^a Chung S. and Lin C. C., *Phys. Rev.* **A17**, 1874 (1978).

^b Fliflet A. W. and McKoy V., *Phys. Rev.* **A21**, 1863 (1980).

^c Fliflet A. W. and McKoy V., *Phys. Rev.* **A21**, etc.

Efeitos de Troca de Spin no Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas de NO

FUJIMOTO, M. M.; MU-TAO, L.; MACHADO, L. E.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

MICHELIN, S. E.

UFSC

O processo de troca de spin influencia fortemente o espalhamento de elétrons de baixa energia por átomos, moléculas e superfícies. Recentemente, Hegemann *et al*^a mediram as seções de choque diferenciais desses processos no espalhamento elástico de elétrons por átomos de Na e Hg e moléculas de camada aberta: NO e O₂. Estes autores constataram que os efeitos de troca de spin para moléculas são bem menores do que para átomos. Paixão *et al*^b efetuaram um estudo teórico sobre a influência de troca de spin em O₂ e atribuíram a média orientacional da molécula em fase gasosa como sendo a principal causa que levou o efeito observado para alvos moleculares serem bem menores que para alvos atômicos.

No presente trabalho, apresentaremos um estudo teórico, realizado pelo nosso grupo, sobre o efeito de troca de spin nas colisões elásticas de elétrons de baixa energia com NO. Utilizamos o Método Variacional Iterativo de Schwinger completado pela Aproximação de Born^c. O potencial utilizado é do tipo estático-troca. Os nossos resultados calculados mostram que os efeitos de troca de spin são realmente pequenos e estão em boa concordância com as médias experimentais. Detalhes serão apresentados no Encontro. Apoio: CNPq, FINEP-PADCT, FAPESP.

^aT. Hegemann, M. Oberste-Vorth, R. Vogts and G. F. Hanne; *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2968 (1991).

^bF. J. da Paixão, M. A. P. Lima and V. McKoy; *Comunicação Privada*, (1992).

^cLee Mu-Tao, L. M. Bescansin, M. A. P. Lima, L. E. Machado, E. P. Leal; *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **23**, 4331, (1990).

SEÇÕES DE CHOQUE DA TRANSIÇÃO VIBRÔNICA $X^1\Sigma_g^+(v=0) \rightarrow C^1\Pi_u(v=0, 1, 2e3)$ DE H₂ POR IMPACTO DE ELÉTRONS.

TAVEIRA, A. M. A.; MACHADO, L. E.; MU-TAO, L.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

UNICAMP

Recentemente, o Método de Ondas Distorcidas (MOD) em primeira ordem tem sido aplicado com sucesso a estudos de certas transições vibrônicas e rovibrônicas associadas às excitações $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow c, d^3\Pi_u$ da molécula de H₂ por impacto de elétrons. Como estas transições são proibidas por spin, apenas as partes de troca dos elementos de matriz de transição (matriz-T) contribuem para o processo. Como consequência a expansão

em ondas parciais dos elementos de matriz-T convergem rapidamente. No entanto, para uma transição que é permitida por dipolo como é o caso da transição $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow C^1\Pi_u$ do H₂, o potencial de interação elétron-H₂ é de longo alcance ($\propto \frac{1}{r^2}$). Desta forma, a expansão em ondas parciais converge muito lentamente e portanto o esforço computacional se torna muito grande. Para evitar isso vamos utilizar o método de completexa que foi desenvolvido por nós para cálculo de seções de choque de colisões elásticas de elétrons por moléculas. A idéia deste método se baseia no fato de que os elementos de matriz-T da expansão em ondas parciais, para l grandes, podem ser aproximados pela primeira aproximação de Born. Desta forma a expansão pode ser corrigida até o infinito. Serão mostrados no Encontro nossos resultados para seções de choque de excitação vibrônica na faixa de energia do elétron incidente entre 15 e 40 eV. Apoio: CNPq, CAPES, FAPESP e FINEP/PADCT.

ESTUDOS DE IONIZAÇÃO ATÔMICA POR IMPACTO DE ELÉTRONS. I - Ionização do Hélio no caso coplanar

MACHADO, A.; MONZANI, A. L.; MACHADO, L. E.;

MU-TAO, L.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger (SVIM)^a, em combinação com o método de ondas distorcidas (MOD)^b está sendo utilizado por nosso grupo para o estudos dos processos de ionização atômica por impacto de elétrons. Nos casos de ionização simples, em que um único elétron é ejetado do alvo [o chamado processo (e^- , $2e^-$)] a técnica de espectroscopia de coincidência elétron-elétron pode levar à determinação experimental das seções de choque triplamente diferenciais, $\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE}$ onde Ω_1 e Ω_2 são os ângulos sólidos nas direções dos elétrons do estado final e E é a energia de um desses elétrons. Neste trabalho iremos apresentar resultados preliminares de seções de choque triplamente diferenciais para a ionização do átomo de He no caso em que os momentos lineares dos três elétrons de espalhamento estão num mesmo plano. As energias do elétron incidente variam desde 4 eV (acima do limiar de ionização) até 100 eV. Para estas mesmas geometria e faixa de energia existem resultados teóricos recentes^{c d} baseados na Primeira Aproximação de Born ou no MOD, com efeitos de troca incluídos a nível de aproximações locais. Nosso modelo se baseia no MOD, mas efeitos de troca são introduzidos de forma exata via SVIM. Nossos resultados são comparados também a resultados experimentais^e disponíveis na literatura. Apoio: CNPq, FINEP-PADCT, FAPESP.

^aLucchese R. R., Raseev G. and McKoy V., *Phys. Rev.* **A25**, 2572 (1982).

^bFlifet A. W. and McKoy V., *Phys. Rev.* **A21**, 1863 (1980).

^cRösel T., Röder J., Frost L., Jung K., Ehrhardt H., Jones S. and Madison D. H., *Phys. Rev.* **A46**, 2539 (1992).

^dZhang X., Whelan C. T. and Walters H. R. J., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **23**, L509 (1990).

^eTweed R. J., *Lecture Notes in Chemistry* **35**, 220 (1984).

Efeitos de Troca de Spin no Espalhamento Elástico de Elétrons por Moléculas de Oxigênio

RIBEIRO, E. M. S.; MACHADO, L. E.; MU-TAO, L.; FUJIMOTO, M. M.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

O processo de troca de spin influencia fortemente o espalhamento de elétrons de baixa energia ($E_0 \leq 50\text{eV}$) por átomos, moléculas e "clusters". Recentemente, Hegeman *et al*^a mediram as seções de choque diferenciais desses processos no espalhamento elástico de elétrons por átomos de *Na* e *Hg* e moléculas de camada abertas, *NO* e *O₂*. Estes autores constataram que os efeitos de troca de spin para moléculas são bem menores do que para átomos. Num estudo muito recente, Paixão *et al*^b atribuíram este efeito à média orientacional que deve ser feita no caso de alvos moleculares na fase gasosa. No presente trabalho aplicamos o Princípio Variacional de Schwinger^c para o estudo das colisões elásticas $e^- - O_2$, com ênfase na investigação de processos de troca de spin. Para tanto obtivemos a razão de polarização (P'/P), para orientações selecionadas do alvo, bem como sua média sobre estas orientações. Foram calculadas também seções de choque diferenciais elásticas, na faixa de energia E_0 de 5 a 200eV. Neste caso utilizamos o método variacional iterativo de Schwinger completado com Born. Mais detalhes serão apresentados no Encontro.

Apoio: CNPq, FINEP-PADCT, FAPESP.

^aT. Hegeman, M. Oberste-Vorth, R. Vogts and G. F. Hanne; *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2968 (1991).

^bF. J. da Paixão, M. A. P. Lima and V. McKoy; *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1698 (1992).

^cR. R. Lucchese, G. Raseev and V. McKoy; *Phys. Rev. A* **25**, 2572 (1982).

ESTUDOS DE IONIZAÇÃO ATÔMICA POR IMPACTO DE ELÉTRONS II - Ionização do Hélio no plano perpendicular

MONZANI, A. L.; MACHADO, A. M.; MACHADO, L. E.; MU-TAO, L.

UFSCar

BRESCANSIN, L. M.

Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger (SVIM)^a, em combinação com o método de ondas distorcidas

(MOD)^b está sendo utilizado por nosso grupo para o estudo dos processos de ionização atômica por impacto de elétrons. Nos casos de ionização simples, em que um único elétron é ejetado do alvo [o chamado processo ($e, 2e$)], a técnica de espectroscopia de coincidência elétron-elétron pode levar à determinação experimental das seções de choque triplamente diferenciadas (SCTD), $\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE}$, onde Ω_1 e Ω_2 são ângulos sólidos nas direções dos elétrons do estado final e E é a energia de um desses elétrons. Neste trabalho iremos apresentar resultados preliminares de SCTD para a ionização do átomo de *He* no caso em que os momentos lineares dos elétrons do estado final estão num plano perpendicular à direção do momento linear do elétron incidente. As energias do elétron incidente variam de 4 eV (acima do limiar de ionização) até 100 eV. Para estas mesmas geometria e faixa de energia existem resultados teóricos recentes^c, baseados na Primeira Aproximação de Born ou no MOD, com efeitos de troca incluídos a nível de aproximações locais. Nosso modelo se baseia no MOD, mas efeitos de troca são introduzidos de forma exata via SVIM. Nossos resultados são comparados também a resultados experimentais^d disponíveis na literatura. Apoio: CNPq, FAPESP E FINEP-PADCT.

^aR. R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, *Phys. Rev. A*, **25**, 2572 (1982)

^bArne W. Fliflet and Vincent McKoy, *Phys. Rev. A* **21**, 1863 (1980)

^cT. Rösel, J. Röder, L. Frost, K. Jung, H. Ehrhardt, S. Jones and D. H. Madison, *Phys. Rev. A*, **46**, 2539 (1992).

^dX. Zhang, Colm T. Whelan and H. R. J. Walters, *J. Phys. B*, **23**, L173 (1990)

^eM. B. J. Woolf, F. H. Read, S. Cvejanovic and P. Hammond, como citado na ref.(d) (1990)

CARACTERIZAÇÃO DE TUBEIRAS PARA GERAÇÃO DE FEIXES MOLECULARES

TOLEDO, A. O. DE; NOVAIS, A. R.; SANTOS, A. M.

DOS

CTA/IEAv - Divisão de Lasers - São José dos Campos - SP

Os feixes moleculares têm-se mostrado ferramentas de grande utilidade nas diversas áreas de pesquisas da Física Atômica e Molecular, especialmente em Espectroscopia. Entretanto, antes de serem usados, é necessário que se conheçam suas características em cada caso, tais como distribuição de velocidade, de densidade, temperaturas vibracionais, rotacionais e translacionais.

A análise feita, neste trabalho, considera um modelo unidimensional simples de escoamento, tomando-se medidas no domínio do tempo onde a função de abertura da válvula foi estimada a partir de perfis obtidos com feixe de laser infravermelho cw.

A função distribuição de velocidade é obtida através da deconvolução da função de abertura da válvula com

a própria distribuição, o que é feito por um método numérico.

As medidas foram obtidas através de um medidor de ionização em uma câmara de expansão operando em vácuo a aproximadamente 10^{-6} Torr.

O jato molecular foi produzido por uma válvula operando com pulsos de largura da ordem de 120 μ s a 25 Hz, onde se podia adaptar tubearias com diversos perfis. O gás utilizado nos experimentos foi o SF₆ em várias pressões de estagnação.

O objetivo final é o de se determinar qual das situações apresentam melhores condições de condensação, i.é., de formação de aglomerados.

INFLUÊNCIA DA PERDA DE ENERGIA NUCLEAR NA DESSORÇÃO DE H⁺ INDUZIDA POR FEIXES DE MeV

PEREIRA, J. A. M.; SILVEIRA, E. F. DA; LEITE, C. V. B.; JERONYMO, J. M. F.

Depto. de Física - PUC-Rio

BAPTISTA, G. B.

Depto. de Física - UENF

Feixes de Carbono, com energias entre 1.0 e 2.5 MeV e estados de carga de +1 até +4, produzidos pelo acelerador Van de Graaff da PUC-Rio, foram utilizados para induzir a desorção iônica em amostras de Ni e Pd. Os íons desorvidos foram analisados pela técnica de tempo-de-vôo. É usualmente aceita a idéia de que esse fenômeno é provocado por colisões eletrônicas, já que na faixa de energia estudada a perda de energia eletrônica é cerca de 10 vezes maior do que a nuclear e cresce com a velocidade do projétil. No entanto, para o caso da experiência em questão, foi verificado que o rendimento de desorção do H⁺ (YH⁺) decresce com a velocidade. Mais precisamente, observou-se que YH⁺ obedece a relação empírica $YH^+ = Y_0 + \alpha \times q^3 = A(1 + aq^3)/v^2$ onde $Y_0 = A/v^2$ é proporcional a uma potência da perda de energia nuclear, $a = \alpha/Y_0$ e q, v são o estado de carga e a velocidade do projétil respectivamente. Os parâmetros Y_0 e α apresentam a mesma dependência com a velocidade do projétil. Tais resultados indicam que a perda de energia nuclear tem um papel importante no fenômeno. É necessário reavaliar as idéias sobre a importância das colisões eletrônicas na desorção do íon H⁺.

PARÂMETROS DE COERÊNCIA E CORRELAÇÃO PARA OS ESTADOS

$d^3\Pi_u^-(v = 0, 1, 2, 3; N = 1)$ DO H₂

MENESES, G. D.; BRESANSIN, L. M.

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP,

MU-TAO, L.

Departamento de Química, UFSCar

MICHELIN, S. E.

Departamento de Física, UFSC

MACHADO, L. E.

Departamento de Física, UFSCar

CSANAK, G.

LANL, Los Alamos, NM 87545, USA

Apresentamos neste trabalho os resultados de um cálculo de parâmetros de coerência e correlação e seções de choque resolvidas rotovibracionalmente para a excitação $X^1\Sigma_g^+(v = 0; N = 1) \rightarrow d^3\Pi_u^-(v = 0, 1, 2, 3; N = 1)$ em H₂ por impacto de elétrons na faixa de energia incidente de 15 a 40 eV. A parte eletrônica da amplitude de espalhamento para uma dada distância internuclear é obtida através da aproximação de ondas distorcidas (DWA) [1] e as funções de onda do elétron espalhado são obtidas usando o Método Variacional de Schwinger Iterativo [2]. Com o auxílio da amplitude de espalhamento eletrônica, as amplitudes estado-a-estado (vibrorotacionais) são obtidas no contexto da aproximação adiabática. Estas, por sua vez, são utilizadas para se obter os parâmetros de Stokes, de orientação e alinhamento, polarizações, etc, seguindo as relações gerais contidas na referência [3].

Referências

[1] A. W. Fliflet and V. Mckoy, Phys. Rev. A21, 1863 (1980). [2] R. R. Luchese, G. Raseev and V. Mckoy, Phys. Rev. A25, 2572 (1982). [3] K. Blum and H. Jakubowicz, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 11, 909 (1978).

Apoio: CNPq, FAPESP

Método da entropia máxima aplicado ao espalhamento colinear H-H₂

FIGUEIREDO NETO, A. D. DE; ROCHA FILHO, T. M. DA; CADILHE, M. W.; OLIVEIRA JUNIOR, Z. T. DE

Departamento de Física - UnB

Aplicamos o método da entropia máxima desenvolvido por Alhassid e Levine que permite uma abordagem algébrica para os problemas de espalhamento em Mecânica Quântica. O método supõe que o estado inicial é representado por uma matriz densidade obtida maximizando-se a entropia associada à informação resultante da medida de um conjunto de observáveis que preparam esse estado. O cálculo da evolução da matriz densidade associada ao sistema se reduz então à resolução de um sistema de equações diferenciais não-lineares para parâmetros associados ao operador de evolução da álgebra dinâmica do sistema. O método requer que a hamiltoniana do sistema pode ser "expandida" em termos de operadores, que constituirão a citada álgebra dinâmica do sistema, que por sua vez devem formar uma álgebra de Lie. Essa última condição restringe a forma funcional do potencial de interação, sendo que em geral faz-se uma aproximação harmônica para este. Recentemente Levine propôs um aprimoramento do método utilizando variáveis vestidas ("Dressed Variables"). Neste trabalho aplicamos o método ao espalhamento colinear H-H₂ e discutimos sua relevância ao estudo de problemas de espalhamento.

MEDIDAS DE ALCANCES DE Au, Cs E Pb EM GaAs

HERBERTS, M. R.; FICHTNER, P. F. P.; BEHAR, M.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Estudos sistemáticos realizados nos últimos anos mostraram discrepâncias entre os valores de alcances teóricos de Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) e experimentais em alvos de Si, SiC, C, B, Be. Portanto torna-se interessante estender estes estudos para outros substratos de interesse tecnológico como GaAs, onde já foram detectadas diferenças. Com este fim implantamos Au, Cs e Pb em GaAs com energias de 20-200 KeV, com correntes menores que $1 \mu A \text{ cm}^{-2}$. O objetivo do trabalho foi comparar os alcances medidos com as previsões teóricas de ZBL. As medidas foram feitas utilizando a técnica de retroespalhamento RUTHERFORD (RBS), usando partículas α de 760 KeV com resolução de 13 KeV. Os resultados obtidos mostram que para altas energias os dados teóricos e experimentais concordam e a baixas energias ocorrem discrepâncias de 15 a 20%. Cálculos teóricos estão sendo feitos para explicar estas diferenças.

Multiplication Factor In Multiwire Chambers A Bethe Born Formulation

ALMEIDA, D. P.; SOARES, I. M.; CEIA, M. A. R. DE; SILVA, L. R. DA
UFRJ

Gas phase detectors and, in special, multiwire chambers still playing a relevant role in ionizing particles detection. The knowledge of physical processes, occurring during the signal development, is fundamental for optimization of such devices at the design stage. Moreover, a model describing the electronic avalanche is valuable for understanding the interplay of the external electric field in the drift regions. Previous works discuss models that express the relation between pulse high and the incident ionizing radiation energy. Usually, the gaseous multiplication effect is described in terms of Townsend's first coefficient α . There is no expression in the literature covering all the α range. Several authors, however, have proposed empirical expressions, but these are suitable only for well defined ranges of electrical field. α is a macroscopic quantity defined statistically, and that depends on the average effect of many electronic collisions. Traditionally, only empirical approaches have been tried to deal with the process of electron multiplication. Theoretical models capable of describing α 's physical nature can be an important tool in understanding electronic avalanche effect. The present paper describes the electronic multiplication factor $\left(\frac{n}{n_0}\right)$ in terms of the Bethe formulation, assuming the binary encounter between (drifted by an external electrical field) and the gas atoms, which result in the media ionization reaction is considered. The theoretical results

agree well with previous empirical models and to experimental data available in the literature.

MEDIDAS DA SEÇÃO DE CHOQUE DE IONIZAÇÃO POR IMPACTO DE ELÉTRONS PARA OS GASES NOBRES (Ar^{7,8+}) E (Ne⁵⁺) COM DETERMINAÇÃO DO ELEMENTO DE MATRIZ QUADRADA (M_n²) PARA A TRANSIÇÃO.

ALMEIDA, D. DE P.; GODINHO, C. F. DE L.
UFRJ
SANTOS, A. C. F. DOS
PUC

Colisões de elétrons com átomos e moléculas são uma das mais importantes interações em física. As medidas de seções de choque absolutas de ionização por impacto de elétrons possuem importância relevante para aplicações em astrofísica, física dos plasmas e física das radiações. Muitos espectrômetros comerciais também usam impacto de elétrons como ferramenta analítica para se medir concentrações de espécies em amostras gasosas. A importância física e tecnológica do conhecimento das seções de choque de ionização a grande discordância existente na literatura e o custo relativamente baixo que um aparato experimental para medidas de seções de choque de ionização por impacto de elétrons possui, são excelentes motivações para se enveredar por esta área do conhecimento físico. Neste trabalho, apresentamos as seções de choque de ionização por impacto de elétrons do argônio, na seguinte reação $e + \text{Ar} \longrightarrow \text{Ar}^{n+} + (n+1)e$, com $n = 7,8$ e do neônio na reação $e + \text{Ne} \longrightarrow \text{Ne}^{5+} + 6e$. Nossas amostras foram bombardeadas por elétrons em uma faixa de energia que variou de 1.0 a 3.0 keV. O vácuo conseguido girou em torno de $1.0 \text{ E-}7$ Torr, os resultados foram normalizados pelos nossos valores obtidos para a seção de choque do argônio duplamente ionizado (Ar^{2+}), e pela seção de choque total do neônio respectivamente. Calculou-se também os elementos de matriz quadrada para as transições ocorridas, utilizando-se para este fim uma expressão obtida semiempiricamente no contexto da primeira aproximação de Born.

ESTUDO DE TRANSIÇÕES ENTRE ESTADOS METAESTÁVEIS DO HÉLIO POR IMPACTO DE ELÉTRONS VIA APROXIMAÇÃO DE MUITOS CORPOS UNITARIZADA

SILVA JR, O. S.
Depto. Física, Univ. Federal de Sergipe

A aproximação de muitos corpos unitarizada (UMB) foi empregada anteriormente para estudar a excitação de estados tripleto do hélio a partir do estado fundamental, com resultados alentadores para a seção de choque diferencial de espalhamento, comparáveis às previsões de

métodos muito mais sofisticados e que exigem grandes recursos computacionais (*close-coupling*). A boa qualidade dos resultados unitarizados se deveu ao fato de que a aproximação leva em conta o acoplamento entre os estados envolvidos no cálculo.

Neste trabalho aplicamos a aproximação UMB para calcular seções de choque diferenciais para espalhamento de elétrons por átomos de hélio induzindo transições a partir do estado metaestável 2^3S , na região de energias intermediárias, caso para o qual há poucas previsões teóricas na literatura. Serão apresentados também resultados UMB para os parâmetros de orientação e alinhamento associados às transições $2^3S \rightarrow 2, 3^3P$.

ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE ÁGUA.

MICHELIN, S. E.; KROIN, T.

UFSC

MU-TAO, L.

DQ-UFSCar

MACHADO, L. E.

DF-UFSCar

Em estudo recente Lee e outros, mostraram que o método de ondas distorcidas (MOD), para cálculos de seção de choque, fornece resultados idênticos ao método multicanal de Schwinger, a nível de apenas dois canais, porém o MOD possui a vantagem de ser matematicamente e computacionalmente mais simples. Existe uma boa concordância de valores à medida que a energia do elétron incidente aumenta, onde os efeitos de correlação são desprezíveis. Em artigo recente, o MOD foi estendido à moléculas não lineares de simetria C_{2v} , porém com cálculos de seções de choque diferenciais inelásticas até $30eV$, para a excitação $3a_1^2 \rightarrow 3sa_1$, para moléculas de água. Neste trabalho, apresentamos resultados para energias na faixa de $30eV - 150eV$, para a excitação anterior e para $3a_1^2 \rightarrow 3pa_1$. Os resultados mostram uma regularidade muito boa para o comportamento da SCDI. Infelizmente a lacuna de dados experimentais e teóricos, para moléculas deste tipo, impossibilita a comparação com os dados obtidos.

ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR MOLÉCULAS DE N_2O .

MICHELIN, S. E.; KROIN, T.

UFSC

MU-TAO, L.

DQ-UFSCar

O óxido nitroso é uma molécula que tem despertado o interesse de pesquisadores da química, biologia e física nos últimos anos. Porém a despeito deste interesse, muito pouco se conhece sobre esta molécula, sendo os resultados conhecidos motivo de dúvidas por parte destes pesquisadores. Um exemplo deste fato diz respeito à excitação eletrônica da molécula de N_2O por impacto

de elétrons, onde os poucos trabalhos experimentais existentes fornecem informações incompletas a este respeito. Com respeito a trabalhos teóricos para a excitação eletrônica desta molécula, até onde pudemos averiguar, não existe nenhum dado disponível na literatura. Neste trabalho apresentamos cálculos de seção de choque de excitação eletrônica para moléculas de N_2O utilizando o método de ondas distorcidas (MOD). A descrição das funções de onda de espalhamento é dada pelo método variacional de Schwinger iterativo, sendo a matriz de transição T descrita pelo MOD. A faixa de energia dos elétrons incidentes varia de $15eV$ até $150eV$, e discutiremos os resultados para dois níveis de excitação eletrônica os quais serão: $X^1\Sigma \rightarrow a(^3\Pi)$ e $X^1\Sigma \rightarrow A(^1\Sigma^+)$.

SEÇÕES DE CHOQUE DIFERENCIAIS "ESTADO-A-ESTADO" PARA ALGUMAS TRANSIÇÕES DA MOLÉCULA DE HIDROGÊNIO INDUZIDAS POR IMPACTO DE ELÉTRONS

MACHADO, L. E.; MU-TAO, L.

UFSCar

MICHELIN, S. E.

UFSC

BRESCANSIN, L. M.; MENESES, G. D.

Unicamp

O método variacional iterativo de Schwinger (SVIM)^a, em combinação com o método de ondas distorcidas (MOD)^b foi utilizado para a determinação de seções de choque diferenciais "estado-a-estado" para as transições $X^1\Sigma_g^+ (v_o = 0; N_o = 0, 2, 3, 4) \rightarrow c^3\Pi_u^- (v_1 = 0, 1, 2, 3; N_1 = 2)$ do H_2 induzidas por impacto eletrônico. Estas seções de choque são importantes para vários campos de pesquisa, tais como a Física dos Plasmas Frios, a Química dos Plasmas, Lasers e Astrofísica. Apesar disso, quase nenhum dado existe sobre tais parâmetros, porque a sua determinação, tanto experimental quanto teórica é bastante difícil. Do ponto de vista experimental, a observação de transições "estado-a-estado" exige a resolução, direta ou indireta, de estados rotacionais individuais. Do ponto de vista teórico os acoplamentos dos estados envolvidos nestas transições ("rovibrônicas") são difíceis de ser corretamente descritos. Apesar disso, num artigo recente, Ottinger e Rox^c publicaram dados experimentais de seções de choque integrais para transições do H_2 com um estado final específico ($c^3\Pi_u^- (v_1 = 0, 1, 2, 3; N_1 = 2)$), sem entretanto resolver para os estados rotacionais iniciais do estado $X^1\Sigma_g^+ (v_o = 0)$. Sabe-se que as populações dos estados com $N_o > 4$ no estado fundamental do H_2 , à temperatura ambiente, são desprezíveis. Desta forma, a soma sobre os estados rotacionais iniciais (até $N_o = 4$) das seções de choque rovibrônicas do presente trabalho pode ser comparada diretamente com aqueles resultados. Nossos resultados mostram uma boa concordância

com estes dados. Apoio: CNPq, FINEP-PADCT, FAPESP.

^aLucchese R. R., Raseev G. and McKoy V., *Phys. Rev. A* **25**, 2572 (1982).

^bFlifet A. W. and McKoy V., *Phys. Rev. A* **21**, 1863 (1980).

^cOttinger Ch. and Rox T., *Phys. Lett.* **161A**, 135 (1991).

**EXCITAÇÃO ELETRÔNICA E
FRAGMENTAÇÃO IÔNICA DE
MOLÉCULAS INDUZIDAS POR ELÉTRONS
E POR FÓTONS: CO_2 E CS_2**

ROCCO, M. L. M.; BOECHAT-ROBERTY, H. M.;
TURCI, C.; SOUZA, G. G. B. DE
UFRJ

MUNDIM, M. S. P.
UFBA

Em nosso laboratório o estudo da excitação eletrônica e fragmentação iônica de moléculas tem sido efetuado usando diversas técnicas experimentais: Espectroscopia de Perda de Energia de Elétrons (EPEE), Espectroscopia de Fotoelétrons (EF), Espectroscopia Auger (EA) e Espectrometria de Massas (EM). No presente trabalho apresentamos, como exemplo, resultados recentes obtidos com a técnica de EPEE e EM para as moléculas de CO_2 e CS_2 . Para ambas as moléculas foram medidos espectros de excitação, com variação angular, nas regiões de valência e de carbono 1s. A fragmentação iônica, induzida por Raio-X e por feixe de elétrons, foi estudada através do emprego de um espectrômetro de massas do tipo tempo-de-vôo, projetado e construído em nosso laboratório.

BIOFÍSICA

Workshop: Canais Iônicos em Sistemas Biológicos (BIO) – 08/06/94

RELAÇÃO ESTRUTURA-FUNÇÃO EM CANAIS IÔNICOS

CARVALHO, A. C. C. DE
UFRJ

Canais iônicos são formados por proteínas integrais da membrana celular. A presença destas proteínas cria um ambiente hidrofílico, com alta constante dielétrica, necessário para permitir o fluxo de íons através da membrana celular, basicamente constituída por uma bicapa lipídica altamente hidrofóbica. Os canais iônicos podem ser classificados em dois grandes grupos, de acordo com o principal mecanismo de ativação (abertura dos canais): canais ativados por voltagem (campo elétrico através da membrana) e canais ativados por ligantes (substâncias químicas como neurotransmissores, ATP e mesmo íons). Nos deteremos na análise da relação estrutura-função nos primeiros. Num modelo bastante simplificado podemos supor que os canais ativados por voltagem podem assumir dois estados básicos: abertos ou fechados, dependendo do campo elétrico através da membrana celular. Alterações no campo elétrico são percebidas pela molécula proteica que pode então alterar seu estado através de uma mudança conformacional. Em geral os canais ativados por voltagem encontram-se fechados quando a célula está em repouso (potencial transmembrana de -80 mV, interior negativo) e abrem-se durante a despolarização (variação do potencial no sentido positivo). A manutenção de um campo elétrico alterado por um tempo prolongado pode levar a uma segunda alteração conformacional na molécula proteica levando-a para um estado não condutor, mas distinto do fechado, denominado de estado inativado (inativação por voltagem). Os canais ativados por voltagem tem um arranjo estrutural bastante semelhante, com quatro domínios altamente homólogos na molécula proteica, havendo seis segmentos transmembrana em cada um destes domínios homólogos. Estes canais podem ser subdivididos com base no principal tipo de íon que os atravessa; temos assim canais de sódio, potássio e cálcio, por exemplo. As técnicas de biologia molecular, com a expressão das proteínas formadoras de canal em sistema exógeno, aliadas a técnicas eletrofisiológicas tem possibilitado um enorme avanço na compreensão do modo de operação dos canais iônicos. A observação da atividade de um único canal iônico (uma única molécula proteica) com resolução temporal da ordem de milissegundos e a possibilidade de alterar puntualmente amino-ácidos na proteína permitiram identificar nos últimos anos as regiões proteicas responsáveis pelas diversas funções exibidas pelos canais iônicos. A região responsável pela sensibilidade a voltagem no processo de abertura dos canais ativados por voltagem está razoavelmente mapeada. Amino-ácidos responsáveis pela seletividade dos canais de cálcio foram identificados. Mecanismos de inativação dos canais iônicos pela própria voltagem foram também mapeados a grupos de amino-ácidos citoplasmáticos, especialmente em canais seletivos para potássio. A região que forma a parede do canal iônico, criando o ambiente hidrofílico que permite o fluxo iônico, também já foi identificada. Durante a apresentação mostraremos modelos estruturais para os principais canais ativados por voltagem e as evidências experimentais que possibilitaram mapear funções como ativação e inativação por voltagem e seletividade, a resíduos ou grupos de resíduos de amino-ácidos na molécula proteica formadora do canal.

MÉTODOS DE ESTUDO DOS CANAIS IÔNICOS EM SISTEMAS BIOLÓGICOS

VARANDA, W. A.
USP-Ribeirão Preto

A existência de uma diferença de potencial (DP) elétrico através da membrana celular é comum a todas as células estudadas até o momento, onde está sempre associada a difusão diferencial de íons através da membrana. Nos chamados tecidos excitáveis (músculo e nervo) variações transientes neste potencial originam o chamado potencial de ação, que serve para a transmissão de informações entre as células do tecido. Duas propriedades da membrana celular são responsáveis pela origem e característica da DP. Primeiro, devido a presença de uma bicamada lipídica, a membrana celular comporta-se, do ponto de vista elétrico, como um capacitor; segundo, devido as proteínas integrais de membrana, que servem como via de migração iônica com alta constante dielétrica, a membrana apresenta também propriedades resistivas. Em termos genéricos, o controle sobre as vias resistivas é que permite à célula modular a

magnitude de sua DP. Fenomenologicamente, a DP pode ser tomada como decorrente do funcionamento integral da membrana celular e, portanto, como uma propriedade macroscópica do sistema. Microscopicamente esta DP tem sua origem a nível dos canais iônicos formados por moléculas proteicas. Assim, tem se identificado vários tipos de canais iônicos classificados de acordo com sua seletividade e/ou sensibilidade a transmissores químicos. Do ponto de vista eletrofisiológico tem se empregado basicamente dois tipos de experimentos na análise de proteínas formadoras de canais iônicos: 1) Reconstituição em bicamadas planas, onde uma bicamada lipídica é montada entre dois compartimentos contendo soluções eletrolíticas e a proteína transportadora, previamente extraída de um tecido por métodos bioquímicos, é então incorporada à bicamada. Dependendo, obviamente, do número de moléculas incorporadas à bicamada torna-se possível medir correntes iônicas fluindo por apenas um desses canais: A grande vantagem desta técnica consiste na possibilidade de termos acesso direto a ambos os lados do canal iônico, controlando as soluções banhantes e também o ambiente lipídico onde a proteína se insere. A grande desvantagem relaciona-se ao processo bioquímico de extração da proteína, que pode levá-la a desnaturação. 2) "Patch-clamp": neste caso as correntes iônicas são registradas com a proteína em seu ambiente "natural", qual seja, a membrana celular. A técnica consiste basicamente em selar uma micropipeta de vidro (diâmetro de ponta de ~ 1 micron) à membrana celular de modo a delimitar uma área relativamente pequena e que contenha um ou muito poucos canais iônicos. Dessa forma é possível o registro da atividade de uma única molécula formadora de canal. Tecnicamente falando, um experimento eletrofisiológico com canais unitários nos fornece um registro temporal da corrente que flui através dos mesmos. Como a proteína formadora de um dado canal não possui uma estrutura estática, o canal pode assumir pelo menos duas conformações distintas: aberto ou fechado. Dessa forma a corrente unitária apresentar-se-á como pulsos quadrados com magnitude ampere, e tempo de vida na escala de milissegundos. Portanto, de tal registro teremos uma informação sobre a amplitude da corrente unitária, que nos fornecerá a condutância do canal (uma vez que conheçamos a voltagem através do mesmo) e sobre a sua cinética, ou seja, sobre as constantes de velocidade que regem as transições entre os vários estados conformacionais da proteína. Do ponto de vista teórico o modelo pressupõe apenas dois estados cuja probabilidade de existência é determinada por um processo do tipo Poisson. Nesta apresentação pretende-se portanto: 1) Analisar a participação de canais iônicos na gênese de uma DP, 2) Analisar as técnicas eletrofisiológicas para o estudo de canais iônicos, com ênfase em patch-clamp, e 3) Através de resultados experimentais do laboratório do autor mostrar um dos tipos de análise empregados no manuseio de informações conseguidas com a técnica.

The Pore-Forming Protein Secreted By Cytotoxic Lymphocytes

PERSECHINI, P. M.; DANIEL, C. B.; HENRIQUES, A.

Laboratório de Imunobiofísica, Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho da UFRJ

An important issue in understanding biological mechanisms of cell killing is the study of pore-forming peptides. They are molecules containing from approximately 20 to more than 500 aminoacids that can have water and lipid membrane soluble states. These cytotoxic molecules can be produced by a variety of microorganisms and cell types, including some blood cells of mammals. After interaction with a target cell membrane, they usually polymerize and form hydrophilic pores that allow the flux of water, small ions, and other small molecules, disrupting the equilibrium of the intracellular milieu, causing colloid-osmotic swelling, and leading to cell death. The study of these molecules is important to understand cell defence mechanisms and cell mediated immunity in both pathological and normal physiological conditions. The research in this field may also be useful in the design and production of synthetic/recombinant toxins that have potentially large applications in medicine. The pore-forming protein secreted by cytotoxic lymphocytes (perforin) has been purified and cloned. This 70 KDa toxin requires calcium ions to insert and polymerize in lipid membranes. The pores they form may have up to 210 nm internal diameter and conductances ranging from 0.4 to more than 10 nS. The membrane-binding and polymerization mechanisms are not clearly understood and although some models have been proposed, the molecular structure of the pore is not solved. A 20 amino-acid long synthetic peptide comprising the N-terminus of perforin has been shown to be able to make pores in biological and artificial membranes. However, its role in perforin function needs more clarification. Only biophysical and biochemical techniques have been used so far in order to solve these problems. The use of other powerful techniques such as x-ray crystallography and computer-assisted molecular modeling will be of great help.

Métodos Experimentais em Biofísica (BIO, RES) - 08/06/94

ALTERAÇÕES NA LIGAÇÃO DE ACTINOMICINA D AO DNA POR ADIÇÃO DE SOLUTOS NEUTROS.

RUGGIERO, J.; COLOMBO, M.

Depto de Física UNESP S. José do Rio Preto.

A ligação da actinomicina D (act D) ao DNA, tem sido por nós estudada com o objetivo de explorar a contribuição de alterações na atividade do solvente, induzidas pela adição de solutos neutros, na constante de ligação desta droga. Os dados de ligação foram obtidos através de métodos convencionais de titulação espectrofotométrica, e a análise destes dados foi feita através de modelos. No modelo proposto o potencial químico do soluto foi descrito em função do segundo coeficiente do virial, sendo que o termo de volume excluído foi modificado para levar em conta as alterações no número de moléculas de soluto e água liberados na ligação. Os gráficos de $\log(K)$ vs $\log(\chi_w)$ e $\log(K)$ vs $\log(\mu_w)$, onde χ_w e μ_w são respectivamente a fração molar e o potencial químico do solvente, indicam que alguns solutos tais como sacarose, glicose, frutose e sorbitol potencializam a interação da act D ao DNA, enquanto metanol, etanol, glicerol e etileno glicol atuam no sentido de diminuir a ligação. As modificações propostas no potencial químico do solvente forneceram ajuste muito bom dos dados experimentais. Com base no modelo proposto, os diferentes comportamentos observados para açúcares e álcoois são explicados em base à inclusão de álcoois e exclusão de açúcares da camada de hidratação da droga. Desta forma as variações observadas nas intensidades de ligação da droga parecem ser predominantemente dependentes da interação droga-soluto do que de alterações no complexo droga-DNA.

Apoio FAPESP, CNPq e PADCT

ESR e FLUORESCÊNCIA NA DETERMINAÇÃO DO SÍTIO PRIMORDIAL DE INTERAÇÃO DE ANESTÉSICOS LOCAIS COM A Ca^{2+} ATPase DO RETÍCULO SARCOPLASMÁTICO

ANTENEODO, C.; WAJNBERG, E.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

TABAK, M.; NASCIMENTO, O. R.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

LOURO, S. R. W.

Departamento de Física - PUC-RIO

Anestésicos locais derivados de amins terciárias modificam a atividade ATPásica e a fosforilação da Ca^{2+} ATPase por fosfato inorgânico. Para localizar o

sítio primordial de ligação destes anestésicos, associados às modificações funcionais, foram realizados experimentos de ESR de radicais nitróxidos sondando a região proteica da enzima, bem como experimentos de supressão da fluorescência do anestésico para sondar a região lipídica onde a enzima está inserida. Medidas de ESR mostraram que os anestésicos modificam a dinâmica de regiões das cadeias polipeptídicas. Através de fluorescência foi observado que o sítio primordial encontra-se em contato com lipídios, perto da interface com a água. Estas observações conjuntas sugerem um sítio superficial na região anular da proteína. Para estudar a influência dos lipídios no estabelecimento do sítio de interação medimos através de ESR as modificações induzidas pelos anestésicos sobre a enzima solubilizada em detergentes.

ESTUDO DAS INTERAÇÕES DO ÍON COBRE COM OS DIPEPTÍDEOS GLICIL-TRIPTOFANO E TRIPTOFIL-GLICINA ATRAVÉS DE RPE, DC E ABSORÇÃO ÓTICA.

LARA, M. C. F. L. E

UnB

NASCIMENTO, O. R.

IFQSC

Através das técnicas RPE (Ressonância Paramagnética Eletrônica), DC (Dicroísmo Circular) e Absorção Ótica, estudamos dois complexos de cobre, o Glicil-Triptofano e Triptofil-Glicina. Foi possível verificar as mudanças conformacionais, determinar o caráter das ligações metálicas e a influência do resíduo pesado do Triptofano na simetria dos complexos formados em diferentes pH's. Verificamos em que circunstâncias as propriedades espectroscópicas do Glicil-Triptofano em pH alto se aproximam das propriedades apresentadas pelas Proteínas Azuis. Com os dados obtidos experimentalmente, através das diferentes técnicas, propusemos dois modelos teóricos para os complexos com suas respectivas funções de ondas. Para o Triptofil-Glicina nos pH's 9,1 e 13,2 e para Glicil-Triptofano no pH=9,1 propusemos um modelo covalente e para o complexo Glicil-Triptofano no pH=13,2 modelo de mistura de orbitais, que é um modelo não covalente, que consiste basicamente, em considerarmos as funções de onda dos estados 4s e 4p do íon cobre, misturadas com os orbitais 3d do mesmo íon. Os parâmetros experimentais, foram determinados através de simulações espectrais, utilizando programas desenvolvidos para este fim.

Magnetic behavior of $\text{Cu}(\text{L-Asp})(\text{H}_2\text{O})_2$, an alternating linear chain.

PASSEGGI, M. C. G.

INTEC (CONICET-UNL), Argentina

BARBERIS, G. E.

Inst. de Física, UNICAMP

CALVO, RAFAEL

INTEC (CONICET-UNL), Argentina; Fac. de Bioq. y

Ciencias Biol. (UNL) Santa Fe, Argentina; Inst. de

Física, UNICAMP

We report detailed magnetic susceptibility $[\chi(T)]$ and isothermal magnetization $[M(H,T)]$ measurements in the copper complex aminoacid L-aspartic acid. The data was obtained in powdered samples with a Quantum Design SQUID magnetometer, in the temperature $[T]$ range between 1.8 and 80 K, for magnetic fields $[H]$ between 20 G and 55 KG. The magnetic susceptibility displays a wide maximum at 7 K and goes to zero at lower T. This maximum is characteristic of short range magnetic order in a linear chain, and is supported by the polymeric structure for $\text{Cu}(\text{L-asp})(\text{H}_2\text{O})_2$, with -asp-Cu-asp-Cu-asp chains reported recently¹. However, the zero susceptibility in the $T \rightarrow 0$ limit, indicates a singlet ground state, which is obtained if at low temperatures the chain dimerizes and obeys the Hamiltonian:

$$\hat{H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-2J \sum_{i=1}^{N/2} (S_{2i} \cdot S_{2i-1} + \alpha S_{2i} \cdot S_{2i-1}) \right] \quad (1)$$

where J is the exchange interaction coupling constant and α is the alternation parameter. The susceptibility and magnetization data is in good agreement with the behavior predicted by eq. 1, and allows to calculate $\%J/k_B = (-5.32 \pm 0.01)\text{K}$ and $\alpha = (0.20 \pm 0.02)$. The available data does not show a transition from the uniform chain phase¹ at room T, to a dimeric phase at lower T, and the source of the dimerization is being studied.

Supported by FAPESP and CNPq, Brazil, and Fundacion Antorchas, Argentina

¹R. Calvo, C.A. Steren, O.E. Piro, T. Rojo, F.J.H. Zuniga, E. E. Castellano, Inorganic Chemistry 32, 6016 (1993)

ESTUDO DA INTERAÇÃO DA MELATONINA COM MEMBRANAS LIPÍDICAS

SHIDA, C. S.; FREUND, M. T. L.

Instituto de Física da USP

A melatonina (N-acetil 5-metoxitriptamina) é um hormônio derivado do amino-ácido triptofano, secretado pela glândula pineal, estando relacionado com importantes processos biológicos, como o ciclo circadiano e

o processo de envelhecimento, além de estudos mostrem que ela pode retardar o desenvolvimento de processos como imunodeficiência e crescimento de tumores. O presente trabalho estuda a interação de melatonina com membranas lipídicas por espectroscopia de RPE (ressonância paramagnética eletrônica), utilizando o método de marcador de spin, e espectroscopia de fluorescência de estado estacionário. Os fosfolípidios utilizados foram o DMPG (dimiristoil fosfatidilglicerol) e a DMPC (dimiristoil fosfatidilcolina). Os sistemas estudados foram analisados por meio de medidas dos tempos de correlação rotacional perpendicular (τ_{Rperp}) e paralelo (τ_{Rpar}) ao eixo principal do radical nitróxido, parâmetro de ordem efetivo (S^{ef}) e do parâmetro $2A_{max}$. Os resultados experimentais mostram que a melatonina: a) ao contrário da literatura, é solúvel em meio aquoso até a concentração de 5mM, tendo sido desenvolvido um novo método de solubilização; b) interage com membranas lipídicas provocando mudanças estruturais na membrana, na região próxima a cabeça polar, detectada pelos marcadores de spin utilizados, que monitoram diferentes regiões da bicamada lipídica, e pela fluorescência, que mostra que a melatonina não apresenta um deslocamento do máximo de emissão na presença de vesículas de DMPG ou DMPC; c) interage mais fortemente com membranas de DMPG, do que de DMPC; d) em membranas de DMPG, torna mais "fluida" a região da cabeça polar dos fosfolípidios da bicamada, tanto abaixo como acima da temperatura de transição de fase, detectada pelos marcadores de spin SSL (4-esteramida-1-oxil-2,2,6,6-tetrametil piperidina), 5-SASL (5-doxil ácido esteárico) e 6-PC (1-palmitoil-2-(6-doxil ácido esteárico) fosfatidilcolina) e 12-SASL (12-doxil ácido esteárico); e e) por interagir com membranas lipídicas teve o seu coeficiente de partição determinado. Esses resultados apresentam implicações biológicas que abrem a discussão sobre algumas questões interessantes.

APLICAÇÃO DE UM ESPECTRÔMETRO DE MASSA POR TEMPO-DE-VÔO EM ANÁLISE DE MACROMOLÉCULAS BIOLÓGICAS

PINHO, R. R.; MESQUITA, J. A.; PONCIANO, C. R.; CASTRO, C. S. C. DE; SILVEIRA, E. F. DA; JERÔNIMO, J. M. F.; LEITE FILHO, C. V. DE B.; BAPTISTA, G. B.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, PUC-Rio

O PDMS (Plasma Desorption Mass Spectrometry) é uma técnica de espectrometria de massa capaz de analisar massas de grandes peptídeos e proteínas, em particular, de macromoléculas não-voláteis. Nesta técnica, uma amostra sólida, colocada em alta tensão ($\approx 10\text{kV}$), é bombardeada por íons rápidos, como os fragmentos de fissão do ^{252}Cf ou os feixes de um acelera-

dor. Como consequência desse bombardeio, os átomos e moléculas que estavam na superfície, são ionizados e ejetados (dessorvidos) da mesma. A massa de um íon é determinada a partir do tempo (tempo-de-vôo) que o mesmo leva para percorrer uma determinada distância com velocidade constante. O emprego do tempo-de-vôo em espectrometria de massa, permite a construção de um equipamento compacto capaz de analisar uma faixa de massa de até 45000u numa única medida. A sensibilidade deste equipamento é da ordem de 100ng. Nosso instrumento tem cerca de 30cm de extensão, é capaz de analisar massas de até 1000u, com resolução ($m/\Delta m$) de 100, para $m = 120u$. Resoluções mais altas (tão grandes quanto 5000) podem ser atingidas com o uso de um espelho eletrostático adicionado a um equipamento padrão com 1m de extensão.

Interações Moleculares em Sistemas Biológicos (BIO) - 08/06/94

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO COMPOSTO MONOCRISTALINO DIBROMOBIS(1-FENIL-3,5-DIMETILPIRAZOL)COBRE(II) - [CuBr₂(FDMP)₂] VISTOS POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA (RPE).

MUNTE, C. E.; NASCIMENTO, O. R.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

MATTIOLI, M. P. D.

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Estudos estruturais e magnéticos do composto de [CuBr₂(fdmp)₂] constituem-se como principal objetivo do presente trabalho. A existência de interação magnética por parte dos íons de Cu(II) encontrados no monocristal pode ser estudada com o uso da técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE). Tanto a simetria local vista pelo metal, como a interação magnética entre os elementos que compoem o mesmo, são obtidas pela análise dos espectros utilizando-se a Hamiltoniana de spin adequada, e pelo comportamento da largura de linha dos sinais em função de sua anisotropia e com uso de duas frequências de medidas (banda X e banda Q).

As medidas de RPE mostram 3 planos triortogonais contendo os eixos cristalinos, que apresentam apenas uma linha durante toda a variação angular do campo magnético, apesar da existência de dois Cu(II) magneticamente não equivalentes em cada cela unitária. A estrutura hiperfina esperada para o Cu(II) fica escondida na largura de linha devido a intensa interação de troca entre os dois Cu(II) vizinhos. A determinação

da interação magnética de troca, através da análise do tensor g giromagnético e da variação da largura de linha com a orientação do campo magnético nas duas frequências de ressonância (bandas X e Q) estão em andamento.

TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA E DETERMINAÇÃO DE DISTÂNCIAS INTRAMOLECULARES EM PEPTÍDEOS

ITO, A. S.

Instituto de Física da USP

CHAGAS, J. R.; JULIANO, L.

Escola Paulista de Medicina

Ω graus celsius; tempo de deposição: 120 minutos. As preparações do sustrato foram feitas através de vários métodos distintos a fim de poder discutir a forma de nucleação. Vejamos: (i) método clássico, polimento do sustrato com pó de diamante; (ii) recobrimento do sustrato com uma fina camada de grafite; (iii) sustrato sem qualquer tipo de tratamento; (iv) sustrato com pó de diamante espalhado por toda a superfície. As caracterizações foram feitas usando microscopia eletrônica de varredura, onde se pode fazer um estudo da densidade de nucleação e do tamanho de grão.

INTERAÇÃO DE DERIVADOS DE DIPIRIDAMOL COM MICELAS

BORGES, C. P. F.; TABAK, M.

Inst. Física e Química de São Carlos, USP, C.P. 369,

13560-970, São Carlos, SP

A interação de dipiridamol(DIP) e três derivados, RA14, RA47, e RA25 foi analisada utilizando-se absorção óptica e fluorescência. Os derivados de DIP tem em comum o anel pirimido[5,4-d]pirimidina e possuem diferentes substituintes. Titulações fluorimétricas em água dão valores de pK's de 5,8 e 12,5 para DIP, 6,5 e 12,8 para RA47, um único pK em 5,8 para RA14 e pK's de 2,25, 5,8 e 12,1 para RA25. Na presença de micelas de CTAC os valores de pK's mudam para 3,5 e 12,4(DIP), 5,3 e 12,4 (RA47), 3,7(RA14) e 1,9 e 4,9 (RA25). Na presença de micelas de SDS os valores de pK mudam para 7,3 e 14,0(DIP), 7,7 e 13,3(RA47), 7,6(RA14) e 3,4, 8,7 e 13,0(RA25), e em presença de micelas de HPS os valores de pK mudam para 4,3 e 13,1(DIP), 5,7 e 13,0(RA47) e 1,8, 4,9 e 12,4(RA25). As mudanças de pK observadas são devido a um considerável efeito das cargas na superfície das micelas. A análise das mudanças da fluorescência nas titulações de soluções dos derivados com micelas permite estimar as constantes aparentes de ligação para as formas protonada e neutra dos compostos. Observa-se que as constantes para os compostos na forma protonada são menores que na forma neutra. O deslocamento

no pK das drogas correlaciona bem com as constantes de ligação obtidas, sendo que um maior deslocamento, ΔpK , corresponde a uma maior constante de associação, K. Apoio: FAPESP, CNPq e FINEP.

USO DE EPR NA AVALIAÇÃO DE DIFERENTES MANEJOS DO SOLO USANDO SUBSTÂNCIAS HÚMICAS

MAREGA, J. A. M. M.; NASCIMENTO, O. R. DO

IFQSC/USP

MARTIN NETO, L.

CNPDIA/EMBRAPA

VIEIRA, E. M.

IFQSC/USP

MIYAZAWA, M.

IAPAR/PR

No Brasil existem escassos estudos sobre caracterização qualitativa da matéria orgânica submetidas a diferentes tipos de manejo. Neste trabalho realizou-se um estudo para determinar seus efeitos sobre as propriedades do ácido húmico extraídos de um latossolo roxo distrófico após onze anos de contínuo cultivo. Para determinar o grau de humificação das substâncias húmicas foram realizadas medidas de radicais livres pela técnica de RPE e confirmadas pela medida da razão E_4/E_6 , obtidas por absorção eletrônica. Encontrou-se uma concentração de radicais livres semiquinona em torno de 10^{14} spins/g. Comparando amostras de áreas de mata virgem, plantio direto e manejo convencional observou-se uma concentração de radicais na primeira e menor no manejo convencional. Como a concentração de radicais livres indica o grau de humificação do ácido húmico, pode-se concluir que o manejo convencional causa uma decomposição da substância húmica mais intensiva quando comparado com o plantio direto. Usou-se a técnica de RPE para examinar a formação de complexos micronutrientes-substâncias húmicas para amostras em diferentes estágios de purificação. Outra experiência realizada foi a adição de Carbonato de Cálcio em uma turfa da região de Ribeirão Preto. Esta é uma técnica muito usada pelos agricultores para diminuir a acidez do solo. Entretanto, observou-se que a adição de calcário além de diminuir a acidez provoca uma diminuição do grau de humificação.

Interação do íon de Cu^{2+} com os dipeptídeos gly-tyr e tyr-gly: Um estudo por RPE

TOMINAGA, T. T.; NASCIMENTO, O. R.; IMASATO, H.; TABAK, M.

Inst. Física e Química de São Carlos, USP, C.P. 369, 13560-970, São Carlos, SP

Os complexos de Cu^{2+} formados com os dipeptídeos glicil-L-tirosina (gly-tyr) e L-tirosil-glicina (tyr-gly) foram estudados por espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica (RPE) na temperatura ambiente e a $-150^\circ C$. Os parâmetros de desdobramento hiperfinos $A_{//}$, A_o e os fatores $g_{//}$ e g_o dos espectros de RPE obtidos a $-150^\circ C$ evidenciaram três tipos de complexos: CuL_2 ao redor do pH 4,5, $CuLH_2O$ para pH 7,0 a 12,0 e $CuL(OH)_2^{2-}$ para $pH > 12,0$. Para $pH > 10$ estão presentes nos espectros estruturas super-hiperfinas contendo 5 linhas devido ao acoplamento do spin eletrônico do cobre com o spin nuclear do

nitrogênio. Este resultado corresponderia à coordenação de dois

nitrogênios ao átomo central de cobre. Tanto para o gly-tyr como para o tyr-gly, os complexos formados apresentam os espectros em função do pH bastante semelhantes quando medidos a temperatura ambiente. Isto é devido ao movimento rápido dos complexos resultando em espectros isotrópicos, isto é, observa-se a média temporal dos parâmetros espectrais. Desta forma poder-se-ia supor que a distribuição das cadeias laterais não estivessem influenciando no complexo formado. Entretanto, quando a temperatura é abaixada os espectros serão distintos para cada um dos ligantes, especialmente para os complexos formados em meio alcalino. Pode-se observar que o complexo de gly-tyr apresenta simetria inferior que a do complexo de tyr-gly uma vez que o $A_{//}$ para o primeiro dipeptídeo foi de 85G e para o complexo de tyr-gly foi de 195G.

Apoio: CNPq

Estudo de Hemoglobina Nitrosilada por EPR e Espectroscopia Mössbauer

PFANNES, H. -D.; DELANY MARTINS, M. D.

UFMG

BILL, E.; WINKLER, H.; TRAUTWEIN, A. X.

Institut für Physik, Medizinische Universität zu Lübeck, Alemanha

BEMSKI, G.; WAJNBERG, E.

CBPF

Amostras de hemoglobina nitrosilada foram preparadas a partir de hemoglobina de rato fresca enriquecida com ^{57}Fe borbulhando-se NO. Espectros de EPR, bandas -S e -X, a 77K são típicos para $S=1/2$ com tensor-g anisotrópico e exibem interação hiperfina do ^{14}N com o spin eletrônico. Espectros Mössbauer a 4,2K e 100K consistem de uma superposição de espectros de Fe(III)-alto-spin e baixo-spin, deoxi-hemoglobina e um componente correspondendo a $S=1/2$, $g=2$, com constantes hiperfinas $A_{xx}/g_n\beta_n \approx A_{yy}/g_n\beta_n = -19,6T$, $A_{zz}/g_n\beta_n = 6,8T$, $\Delta E_Q = 1,5mms^{-1}$, $I_s = 0,42mms^{-1}$ e largura de linha $0,4mms^{-1}$. A taxa de relaxação spin-rede a 100K é $< 2 \cdot 10^6 s^{-1}$. Apresentamos também espectros de oxi-hemoglobina denaturada e hemoglobina nitrosilada preparada a partir de

adição alternada de pequenas quantidades de ditionita e NaNO_2 até o espectro característico ser obtido.

ESTUDO DA DEPENDÊNCIA DA LIGAÇÃO DE LIPÍDIOS-PEPTÍDEOS COM ATIVIDADE DE ÁGUA

FURQUIM, T. A. C.; MACEDO, Z. S.; ITO, A. S.
Universidade de São Paulo

Estudos da interação entre peptídeos e sistemas modelo de membrana, podem fornecer informações importantes acerca da relação entre a estrutura dos peptídeos e sua função biológica. Este trabalho verificou, através de parâmetros obtidos por espectroscopia de fluorescência e análise termodinâmica, que tipo de informações funcionais e estruturais seria possível obter de um sistema contendo peptídeos melanotrópicos e membranas modelo. Os peptídeos estudados foram: α -MSH (α -melanocyte stimulating hormone), MSH-I ($[\text{Nle}^4, \text{D-Phe}^7]$ - α -MSH) e LTL (lysyl-tryptophyl-lysine) por conterem o resíduo triptofano, o qual consiste num eficiente "probe" fluorescente específico para as propriedades destes sistemas. As membranas modelo utilizadas foram vesículas unilamelares, com diâmetro de aproximadamente 1000 Å, de DMPG (dimiristoylphosphatidylglicerol). Os sistemas foram mantidos em pH 7,03 e temperatura de 40 °C, isto é, acima da temperatura de transição de fase do lipídio. A análise do papel da atividade da água foi realizada através da adição de um soluto neutro, glicose. Observou-se deslocamentos dos espectros de fluorescência para o azul nos três sistemas, bem como aumento na intensidade fluorescente conforme aumentava-se a concentração de vesículas. Também pode-se verificar qual a dependência das constantes de ligação lipídio-peptídeo em função da atividade de água, avaliando-se o papel das forças de hidratação nesta interação. A variação da relação moléculas de água por moléculas de peptídeo pode fornecer uma informação conformacional sobre a penetração do peptídeo na bicamada lipídica e balanço de energia do processo.

Apoio Financeiro: CAPES, CNPq

TEMPO DE RELAXAÇÃO SPIN-REDE DE HEMOPROTEÍNAS DESNATURADAS

ALVES, O. C.; WAJNBERG, E.
CBPF

Estudos de EPR à baixas temperaturas de nitrosil hemoglobina (HbNO) e mioglobina (MbNO) desnaturadas termicamente, e de nitrosil hematina (hematinaNO) são realizados visando uma maior compreensão da estrutura dinâmica e sua relação com a função da proteína. Os espectros de EPR das amostras são estudados no intervalo de 4 K a 280 K. Os espectros de HbNO e MbNO desnaturadas não mudam com a temperatura. Já os espectros de hematinaNO não mudam

até 80 K, mas a partir desta temperatura apresentam um comportamento semelhante ao de HbNO nativa à baixas temperaturas (7.5 K a 104 K). A dependência com a temperatura do tempo de relaxação spin-rede (T_1) das amostras são também estudados. Em temperaturas inferiores à aproximadamente 20 K a principal contribuição para a relaxação em HbNO desnaturada é devido a um termo constante, acima desta temperatura o efeito dependente de T torna-se predominante. Tanto a dependência exponencial ($\exp \Delta/kT$) como (T^n), e os mecanismos de relaxação associados a elas, parecem possíveis para explicar os resultados experimentais. MbNO desnaturada não apresenta um termo constante em baixas temperaturas. Os resultados mostram a relevância da globina para os espectros de EPR e nos mecanismos de relaxação.

SUPRESSÃO DE FLUORESCÊNCIA POR MELANINAS.

SOUTO, A. L. C. F.; KAWAMURA, M. R. D.
IFUSP

Foi já observada a capacidade de melaninas em atuar como supressores de fluorescência quando associadas a diversas macromoléculas ou outros componentes celulares. Levando-se em conta a função protetora usualmente atribuída a essa classe de pigmentos, há hipóteses de que a supressão poderia representar uma forma de proteção. Contudo, tanto essa hipótese quanto a própria supressão tem sido objetos de controvérsias. Como as melaninas absorvem fortemente, a supressão poderia ser um efeito apenas aparente. Para investigar melhor essa questão, bem como a possível ação protetora, utilizamos sistemas modelo constituídos de associações melanina-proteína, irradiados com U.V. e com raios-X, monitorados através de espectroscopia de fluorescência de estado estacionário. Foram analisados efeitos de espalhamento e absorção do supressor, introduzindo-se correções convenientes aos desvios positivos à relação de Stern-Volmer anteriormente observados. Os resultados indicam que ocorre de fato uma forte supressão cuja intensidade depende da natureza da melanina utilizada. Resultados equivalentes foram também obtidos para amostras irradiadas. Contudo, o conjunto dos dados obtidos coloca restrições à hipótese da supressão como mecanismo de proteção.

Photosynthesis induction in dark-adapted plants monitored by Open Photoacoustic Cell Technique: an application to heterosis and stress evaluation

BARJA, P. R.; ROMANO, J. A.; SILVA, G. C.; PEREIRA, A. C.

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP
CELLA, N.

Instituto Politécnico, Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, RJ

SILVA, E. C. DA; MANSANARES, A. M.; VARGAS, H.
Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

The Open Photoacoustic Cell (OPC) technique is a particularly suitable tool for the *in vivo* and *in situ* study of plant leaves, as described elsewhere [1]. In this work we used the OPC technique for monitoring the photosynthesis induction in dark-adapted plants of maize and eucalyptus. The photoacoustic signal in plant leaves has two contributions, namely, the photothermal contribution and the photobaric contribution. The former is related to the heat production in the leaf due to the absorption of the excitation light. The later is due to the oxygen evolution resulting from the photochemical reactions. Both contributions are modulated at the excitation frequency and engender pressure oscillations at the photoacoustic chamber, thus being detected by the microphone. Monitoring the OPC signal of previously dark adapted plant leaves, as a function of the time of exposition to the excitation light, is a straight way to obtain photosynthesis induction curves. For short excitation time the OPC signal represents the photothermal contribution, since no oxygen is evolved immediately after the leaf is exposed to light. The photobaric contribution appears after a characteristic time, and it is superimposed on the photothermal contribution, thus increasing the total signal, which reaches a saturation level for long exposition. The whole curve has, generally, an S-shape. Analyzing this curve, and extracting its characteristic parameters, one can evaluate the photosynthesis efficiency of the plant.

It is presented here data obtained on three maize families, each one consisting of two inbred lines and their hybrid. The photosynthesis efficiency is discussed based upon the plant genotypes. As another application of the technique, one shows results on eucalyptus exposed to different stress conditions.

[1] A. C. Pereira *et al*, Meas. Sci. Technol. **3**, 931 (1992).

ESTUDOS COM MARCADORES DE SPIN DA PROFUNDIDADE DE PENETRAÇÃO DE PEPTÍDEOS MELANOTRÓPICOS EM MEMBRANAS LIPÍDICAS

RISKE, K. DO A.; BIAGGI, M. H.; FREUND, M. T. L.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo - SP

A interação dos peptídeos melanotrópicos, " α -Melanocyte stimulating hormone" (α -MSH, Ac-Ser-Tyr-Ser-Met-Glu-His-Phe-Arg-Trp-Gly-Lys-Pro-Val-NH₂) e do análogo [Nle⁴,DPhe⁷]- α -MSH com membranas lipídicas foi investigada por RPE utilizando-se marcadores de spin. O α -MSH é um hormônio fisiologicamente importante nos processos

que regulam a pigmentação da pele e o seu análogo é mais ativo que o hormônio natural. Embora os hormônios peptídicos interajam com a membrana celular através de receptores proteicos (Castrucci *et al*. Drugs of the Future, **15**, 41, 1990) supõe-se que a fase lipídica das membranas tenha significativa importância, facilitando a interação peptídeo-receptor (Sargent e Schwyzer, Proc.Natl.Acad.Sci.USA. **83**, 57 74, 1986). Vesículas unilamelares (diâmetro aproximado de 1000 Å) de dimiristoil fosfatidilglicerol (DMPG) foram preparadas com 1% em molas de marcadores de spin com o grupo nitróxido em diversas posições da cadeia hidrocarbônica, permitindo assim a monitoração dos efeitos destes peptídeos em diferentes profundidades da bicamada e também a comparação com resultados obtidos por fluorescência (Macedo, Z., Dissertação de Mestrado - USPIF- 1993). A análise dos espectros destes marcadores mostrou que ambos os peptídeos (carregados positivamente em pH fisiológico) interagem com a membrana de DMPG (carregada negativamente) alterando sua estrutura. Foram observadas modificações nos espectros tanto acima quanto abaixo da temperatura de transição de fase do lipídio, sendo que acima os hormônios causam uma diminuição da fluidez da bicamada enquanto abaixo o efeito é oposto. Também foi observado um efeito maior do análogo em relação ao hormônio natural. Apoio Financeiro: CNPq, FAPESP, BID e FINEP.

ESTUDO POR R.P.E. DE TRIGO IRRADIADO COM ⁶⁰Co

CATTANI, M. M.; MASTRO, N. L. D.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares IPEN/CNEN-SP

ITO, A. S.; SANO, W.

Universidade de São Paulo

Um dos mais recentes métodos utilizados para a conservação de alimentos é o da irradiação. Estudamos modificações produzidas pelo processo de irradiação do trigo com raios γ do ⁶⁰Co, através do monitoramento dos sinais de radicais livres induzidos pela radiação. Amostras de trigo foram estudadas na forma de: farelo, gérmen, grão e farinha. O farelo e o gérmen irradiados apresentam um sinal singleto sem estrutura hiperfina, tendo o gérmen um sinal mais largo. Os grãos de trigo inteiros apresentam um espectro R.P.E. complexo, provavelmente devido a uma mistura de radicais induzidos nos seus constituintes. A farinha de trigo, que é predominantemente um polímero de glicose, apresenta espectro composto por 4 tipos de sinais, 2 dubletos e 2 tripletos, conforme resultados de simulação espectral. Neste último caso, os sinais originaram-se de radicais livres localizados em diferentes carbonos da estrutura da glicose. Verificamos ainda que as intensidades dos sinais crescem e saturam com o aumento da dose de irradiação. Finalmente, observamos que a umidade e a pre-

sença de O₂ influenciam no tipo de radical e no número de radicais induzidos além de alterar as cinéticas de decaimento. (Apoio Financeiro: CNPq)

**PENETRAÇÃO DO HORMÔNIO
MELANÓCITO ESTIMULANTE EM
VESÍCULAS DE FOSFOLIPÍDIOS: ESTUDO
ATRAVÉS DA FLUORESCÊNCIA DO
TRIPTOFANO**

MACÊDO, Z. S.; FURQUIM, T. A. C.; ITO, A. S.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

A interação do α -MSH com vesículas fosfolipídicas unilamelares foi estudada por espectroscopia de fluorescência de estado estacionário. O comprimento de onda de excitação era 290nm, correspondendo à excitação do resíduo Trp do α -MSH. Nas titulações com vesículas preparadas com DMPG e DMPS, foram observados deslocamentos espectrais de cerca de 15nm para o azul, e aumentos de rendimento quântico do espectro de fluorescência do α -MSH na presença de vesículas, comparado com o espectro da solução de α -MSH em tampão Hepes (pH=7,2). Este comportamento indica mudança do resíduo Trp do hormônio do meio aquoso para outro meio menos polar. Empregando os dados das titulações, fizeram-se gráficos de Scatchard e Recíprocos, utilizando-se o modelo de Gouy-Chapman para a análise da contribuição eletrostática para a interação. As constantes de dissociação (K_d) e o número de lipídios (n) que interagem com uma molécula de α -MSH determinados foram: $K_d = (9 \pm 1) \cdot 10^{-3} M$ e $n = 9 \pm 4$ para interação com DMPG, e $K_d = (13 \pm 1) \cdot 10^{-3} M$ e $n = 81 \pm 4$ para interação com DMPS. Experimentos de supressão de fluorescência do α -MSH por acrilamida e iodeto indicaram que, em presença de vesículas à proporção de $[DMPG]/[\alpha - MSH] \approx 75$, apenas 60% das moléculas do hormônio encontram-se acessíveis ao supressor. Determinou-se a profundidade de penetração do resíduo triptofano do α -MSH na membrana, através da supressão de fluorescência por marcadores de spin ligados em diversas posições da cadeia hidrocarbônica. Os resultados foram analisados através do método da paralaxe, indicando que o Trp encontra-se a uma distância entre 7.7 e 9.3Å do centro da bicamada. (Apoio financeiro: CNPq, FAPESP e CAPES)

**Observação da germinação de grãos de milho
com holografia**

LESCHÉ, B.; MILMAN, P.

Instituto de Física UFRJ

A holografia é uma técnica de gravação de imagens que permite gravar a informação óptica de maneira completa incluindo informação sobre a fase das ondas luminosas. Com imagens holográficas podemos superimpor as ondas refletidas por um objeto original com as on-

das refletidas por o mesmo objeto após ter sofrido uma pequena deformação. As figuras de interferência resultantes dão informação sobre a deformação. Este é o método de interferometria holográfica. Estudamos os movimentos de grãos de milho durante apenas 2 minutos com interferometria holográfica. Comparamos grupos de grãos secos, molhados e molhados e cozidos. Encontramos os maiores movimentos nos grãos molhados e não cozidos. O método é potencialmente uma ferramenta para estudos dos processos bio-físicos e químicos durante a germinação.

**ESTUDOS ESPECTROSCÓPICOS DE
HEMOGLOBINA DE GLOSSOSCOLEX
PAULISTUS E SUAS SUBUNIDADES:
DICROISMO CIRCULAR E
FLUORESCÊNCIA.**

TABAK, M.; TINTO, M. H.; IMASATO, H.

Universidade de São Paulo-IFQSC

Nos últimos anos temos estudado as propriedades espectroscópicas da hemoglobina (Hb) de *G. paulistus* (G.p.), uma Hb extracelular de peso molecular cerca de 3,1 MDa sendo uma estrutura oligomérica complexa. Estudos recentes de uma Hb homóloga (*L. terrestris*, Ownby et al. 1993) mostraram a existência de trimeros ligados por pontes dissulfeto, monômeros contendo grupos heme e proteínas "linkers", cuja função é estrutural, sem heme. Na Hb de G.p. na forma oxi a cromatografia em pH 7 evidencia uma única banda (proteína não dissociada) e a pH 9 ocorre dissociação em oligômeros (abcd)₂, trimeros e monômeros. Na forma meta a pH 7 a proteína encontra-se na forma não dissociada e a pH 9 a dissociação é completa em duas bandas: trimeros e monômeros. Nos interessa avaliar a contribuição dos resíduos aromáticos para a fluorescência e o dicroísmo circular (DC). Os rendimentos quânticos (RQ) dos triptofanos obtidos foram de $2,9 \times 10^{-3}$ e $4,3 \times 10^{-3}$ para a Hb nativa e o monômero ambos na forma oxi. Na forma oxidada obtivemos RQ de $4,6 \times 10^{-3}$ e $1,6 \times 10^{-2}$ para a proteína íntegra e o monômero. Esses valores são consistentes com os baixos valores de RQ encontrados em hemoproteínas. A análise dos espectros de DC foi realizada usando o algoritmo de "convex constraint" desenvolvido por Fasman e que permite estimar as contribuições de estrutura secundária. Em nosso caso observou-se um baixo conteúdo de α -hélice e uma contribuição significativa dos resíduos aromáticos em especial no caso da metaHb. A modelagem do monômero da Hb de *L. terrestris* está sendo feita por E. Viana e R. Garrat e os resultados preliminares mostram que um dos triptofanos tem uma orientação bastante diferente da que ocorre nas subunidades de Hb humana e mioglobina. Desta forma julgamos que em Hb de G.p. a importância dos resíduos aromáticos seja grande tanto na estrutura secundária quanto na fluorescência. Os dados espectroscópicos em conjunto com a modelagem

fornecem informação estrutural única sobre a proteína.
Apoio: CNPq, FINEP, FAPESP

**ESTUDO POR FLUORESCÊNCIA DA
INTERAÇÃO DO HORMÔNIO
MELATONINA COM MEMBRANAS
LIPÍDICAS**

COSTA, E. J. X.; ITO, A. S.; FREUND, M. T. L.
Instituto de Física da USP

Verifica-se que o hormônio pineal melatonina (5-metoxi-N acetiltriptamina) interage com diferentes células, exercendo várias funções fisiológicas. Seus mecanismos de ação ainda não estão claros, incluindo sua possível capacidade de atravessar a membrana celular e interagir com o próprio núcleo. Alterações na estrutura da membrana lipídica, devido à presença de melatonina já foram monitoradas via ESR de spin labels incorporados em membranas modelo. No presente trabalho apresentamos resultados obtidos através da espectroscopia de fluorescência. A própria melatonina é o fluoróforo cujas características de fluorescência foram acompanhadas para o estudo da sua interação com vesículas

de fosfolipídios. Na faixa de concentrações de lipídios utilizada, problemas sérios de espalhamento mascararam possíveis mudanças nos parâmetros de fluorescência da melatonina. Experimentos foram conduzidos de modo a minimizar ou, quando necessário, corrigir os efeitos de espalhamento, com uso de diferentes geometrias do sistema ótico e vários tipos de cubetas. Resultados com vesículas de DMPG (dimiristoil fosfatidil glicerol) e DMPC (dimiristoil fosfatidil colina) mostram que a constante de ligação da melatonina com os fosfolipídios é dependente da natureza de suas cabeças polares, o que, provavelmente, está refletido na estrutura da superfície da bicamada.

*Workshop: Interação de Fármacos e
Peptídeos com Membranas (BIO, CRI,
RES) - 09/06/94*

**ASPECTOS ESTRUTURAIS, DINÂMICO E FUNCIONAIS DE INTERAÇÕES EM SISTEMAS
BIOLÓGICOS**

SCHREIER, S.

Instituto de Química - Universidade de São Paulo - SP

A análise de propriedades conformacionais de biomoléculas e de alterações dessas propriedades, resultantes de interações com outras biomoléculas é um tema extremamente relevante, na medida em que o desempenho funcional é dependente dessas propriedades e eventos. É de grande interesse poder-se efetuar o exame das propriedades estruturais e dinâmicas através de uma abordagem multi-espectroscópica, onde várias técnicas contribuam, cada uma com as informações específicas que fornecem, para o conhecimento a nível molecular do sistema em estudo. Nesse contexto, o Laboratório de Biofísica Molecular do IQUSP vem enfocando o estudo de vários sistemas, empregando as técnicas de ressonância magnética, eletrônica e nuclear, fluorescência, dicróismo circular, espalhamento de luz quase-elástico. Interações entre membranas lipídicas (ou micelas) e anestésicos locais, hemina, peptídeos e proteínas, entre elas, toxinas, vem sendo estudadas. Os aspectos enfocados referem-se a: quantificação da extensão de ligação dos compostos aos agregados lipofílicos, alteração das propriedades de organização, mobilidade e ainda de permeabilidade desses agregados, alterações conformacionais dos ligantes, alterações de propriedades físico-químicas dos mesmos (por exemplo, grau de ionização), bem como de sua reatividade (velocidade de reações químicas). Outros agregados estudados em nosso laboratório são os formados pelo antibiótico polienico anfotericina B. Diferentes agregados foram caracterizados através de ressonância paramagnética eletrônica, espectros de absorção óptica, dicróismo circular e espalhamento de luz quase-elástico. Distintas propriedades organizacionais dos agregados acarretam diferenças na reatividade química e na toxicidade frente a sistemas biológicos como o fungo *C. albicans* e eritrócitos. Micelas reversas também vem sendo objeto de estudos em nosso laboratório. Trabalho mais recente tem focado emulsões formadas por lipídios constituintes de lipoproteínas humanas. Essas emulsões uma vez na circulação, mimetizam o comportamento das lipoproteínas endógenas, tornando-se assim excelentes candidatas a carregadores de drogas para regiões selecionadas no organismo. Os projetos vem sendo realizados em colaboração com diferentes grupos de pesquisas. Alguns trabalhos mais recentes, tratando desses projetos são:

- 01) Bianconi, M.L. e Schreier, S. (1991) "EPR study of membrane partitioning, orientation and membrane-modulated alkaline hydrolysis of a spin-labeled benzoic acid ester." *J. Phys. Chem.* **95**, 2483-2486.
- 02) Lamy-Freund, M.T., Schreier, S., Peitzsch, R.M. e Reed, W.F. (1991) "Characterization and time-dependence of amphotericin B-deoxycholate aggregation by quasielastic light scattering." *J. Pharm. Sci.* **80**, 262-266.
- 03) Castuma, C.E., Brenner, R.R., De Lucca Gattas, E.A., Schreier, S. e Lamy-Freund, M.T. (1991) "Cholesterol modulation of lipid-protein interactions in liver microsomal membrane. A spin label study." *Biochemistry* **30**, 9492-9497.

- 04) Lamy-Freund, M.T., Ferreira, F.N., Faljoni-Alário, A. e Schreier, S. (1993) "Effect of aggregation on the kinetics of autoxidation of the polyene antibiotic amphotericin B." *J. Pharm. Sci.* **82**, 162-166.
- 05) Souza, L.C., Maranhão, R.C., Schreier, S. e Campa A. (1993) "In vitro and in vivo studies of the decrease of amphotericin B toxicity upon association with a triglyceride-rich emulsion." *J. Antimicrobial Chemother* **31**, 123-132.
- 06) Schmitt, T.H., Frezzatti Jr., W.A. e Schreier, S. (1993) "Hemin-induced membrane disorder and increased permeability. A molecular model for the mechanism of cell lysis" *Arch. Biochem. Biophys* **307**, 93-103.
- 07) Almeida, F.C.L., Chaimovich, H. e Schreier, S. (1994) "Electron spin resonance study of the effect of urea on the properties of AOT reverse micelles in isooctane." *Langmuir*, (in press).

MUDANÇAS CONFORMACIONAIS EM MELANOTROPINAS EM PRESENÇA DE MEMBRANAS MODELO

Ito, A. S.

Instituto de Física da USP

A ação biológica de hormônios peptídeos ocorre através da interação com receptores específicos localizados na membrana celular. O elevado grau de flexibilidade dos peptídeos em meio aquoso pode ser compatibilizado com a especificidade da interação com o receptor pela suposição de que a fase lipídica impõe restrições conformacionais de modo a selecionar estruturas adequadas à ação biológica do hormônio. Mostramos aqui resultados de estudos sobre mudanças conformacionais em hormônios peptídeos em presença de interfaces água-membranas modelo, obtidos através de espectroscopias de fluorescência no estado estacionário e com resolução temporal. O uso da fluorescência é particularmente adequado quando o resíduo triptofano está presente na sequência de amino-ácidos do peptídeo. Diversos parâmetros da fluorescência do trp são utilizados como indicadores, tanto da passagem de um meio aquoso para a bicamada, como de mudança de conformação nessa passagem. A intensidade de fluorescência, o deslocamento espectral e a anisotropia de polarização servem como parâmetros para titulações da interação entre peptídeos contendo triptofano e vesículas de fosfolípidios, permitindo a determinação de constantes de equilíbrio para o processo. Utilizando-se o formalismo de Gouy-Chapman é possível a separação de contribuições eletrostáticas e de interações hidrofóbicas à passagem da água para a fase lipídica. Através de experimentos de supressão de fluorescência por aceitadores incorporados em fosfolípidios, pode-se estimar a distância de penetração do peptídeo na bicamada. Finalmente, a análise dos tempos de vida de fluorescência e das contribuições relativas das diferentes espécies emissoras, permite a verificação de mudanças conformacionais na interação dos peptídeos com as vesículas de fosfolípidios. A modelagem molecular, utilizada em conjunto com os dados de fluorescência, possibilita a confirmação da ocorrência dessas mudanças conformacionais. Apresentamos o exemplo das melanotropinas em interação com vesículas de fosfolípidios carregados, mostrando a correlação entre os resultados obtidos com a espectroscopia de fluorescência e medidas de atividade biológica.

INTERAÇÃO DE FÁRMACOS E PEPTÍDEOS COM MEMBRANAS: ESTUDO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X.

TORRIANI, I. L.

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

A determinação do mecanismo de ação de uma droga pressupõe o conhecimento do nível de ação do fármaco em questão. Em alguns casos, a dificuldade em identificar esse nível torna esse mecanismo um verdadeiro mistério. A nível celular, existem controvérsias sobre o tipo de interação que define a via de acesso à célula. É sabido que muitas drogas atuam diretamente sobre a membrana plasmática e, em particular, na região lipídica das membranas^a. Existe também evidência de que alguns anestésicos gerais atuam diretamente sobre as proteínas de membrana, em sítios hidrofóbicos altamente imobilizados^b. De maneira geral, podemos admitir que (a) as moléculas dos fármacos interagem com as membranas celulares de acordo com a sua solubilidade na fase lipídica e (b) nesse meio elas poderão alcançar concentrações que irão perturbar a ordem das regiões hidrofóbicas modificando sua fluidez. Essas mudanças físicas estão relacionadas com as propriedades farmacocinéticas das drogas e podem ser investigadas por difração de raios X. Esta técnica é capaz de revelar detalhes estruturais a nível atômico em sistemas periódicos

relativamente ordenados. Os lipídios, componentes fundamentais das membranas, possuem regiões de densidade eletrônica diferente - as cadeias acíclicas e os grupos polares. A organização dos lipídios em bicamadas permite a obtenção de estruturas periódicas (multicamadas) preparadas *in vitro* a partir de vesículas de lipídios sintéticos ou extraídos de membranas naturais. Essas estruturas multilamelares possuem uma cela unitária cristalográfica que geralmente é centro-simétrica e consiste de duas monocamadas moleculares. Constituem-se, portanto, em sistemas muito adequados para estudo por difração de raios X. Na interação com um feixe de raios X altamente colimado, as multicamadas se comportam como um cristal unidimensional que difrata a radiação com ângulo de espalhamento 2θ determinado pela periodicidade d da estrutura difratante e pelo comprimento de onda λ utilizado. A simples detecção das linhas de difração lamelar permite determinar, através da lei de Bragg ($\lambda = 2d \sin \theta$), a espessura das bicamadas presentes na amostra. A informação mais importante, entretanto, refere-se à distribuição de densidade eletrônica da estrutura difratante. A síntese de Fourier usando as intensidades das linhas de difração nos permite obter essa informação. Os mapas de densidade eletrônica na direção normal às multicamadas revelam mudanças de fase (ordem-desordem) nas regiões hidrofóbicas das membranas e a localização de determinados grupos atômicos. Devemos notar que esses mapas geralmente são de baixa resolução e correspondem a uma estrutura média temporal, não fornecendo informação sobre a dinâmica da interação (como no caso das técnicas de EPR e NMR). Não precisamos, entretanto, da introdução de sondas, evitando assim qualquer perturbação à estrutura em estudo. A saturação da bicamada com a incorporação das moléculas da droga pode ser detectada. Se ocorre nucleação e formação de uma fase cristalina do composto incorporado, observa-se um espectro de difração superposto àquele da multicamada de lipídios. Em casos por nós estudados foram mostrados os efeitos de interação entre bicamadas de lipídios sintéticos com hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (de possível ação carcinogênica)^c e com a droga citotóxica (anticancerígena) elipticina^d. Os resultados obtidos podem ser interessantes para vários assuntos de investigação atual. Entre eles, a distribuição das drogas na fase lipídica das membranas, a determinação de doses terapêuticas e o encapsulamento de drogas em lipossomas. CNPq.

^aGoodman and Gilman's, *The Pharmacological Basis of Therapeutics*, Macmillan, Inc., N. York (1985).

^bA. S. Evers, B. A. Berkowitz and D. A. Dávignon, *Nature*, **328**, 157 (1987).

^cC. F. de Souza, Dissertação de Mestrado, IFGW - UNICAMP (1985).

^dC. R. Zacharias, Dissertação de Mestrado, IFGW - UNICAMP (1991).

Física Médica das Radiações e do Meio Ambiente (BIO, INS) – 09/06/94

ESTUDO DA MOTILIDADE GÁSTRICA UTILIZANDO TÉCNICAS BIOMAGNÉTICAS

SOUSA, P. L.; BAFFA, O.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto-USP

MIRANDA, J. R. A.

Fac de Fil, Ciências e Letras de Rib Preto-USP e Inst de Biociências Botucatu-UNESP e Inst Física e Química de S. Carlos-USP

OLIVEIRA, R. B.; TRONCON, L. E. A.

Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto-USP

O estudo da motilidade gástrica tem despertado grande interesse e suscitado o desenvolvimento de novos métodos e instrumentos. Um biosusceptômetro AC inicialmente desenvolvido para o estudo do esvaziamento gástrico e medidas de trânsito gastrointestinal^a está sendo utilizado para o estudo da atividade contrátil do estômago distal *in vivo* e não invasivamente quando um

alimento teste contendo marcadores ferromagnéticos é ingerido. Medidas preliminares indicam claramente a presença de sinais associados com esta atividade contrátil, estas medidas estão sendo comparadas com os sinais detectados pelo eletrogastrograma. Como os sinais magnéticos estão associados à movimentação de massas marcadas magneticamente, em princípio, é possível fazer uma modelagem do movimento da massa através do tubo digestivo. Esta é uma informação nova que permitiria uma série de outros estudos da função gastro intestinal.

Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

^aJ.R. A. Miranda, O. Baffa, R.B. Oliveira e N.M. Matsuda, *Med Phys*, 19(2):445-448 (1992). R.B. Oliveira, J.R.A. Miranda, O. Baffa, C.R. Cambrea e L.E.A. Troncon. *Biomagnetism'91: Clinical Aspects*, M.Hoke et al. Editores, pp:631-634 (1992) Elsevier Sci. Publ.

Efeitos da Radiofrequência(rf) e Gradientes de campo Magnético, na mucosa palatina de fetos de rato

DURAN, J. E.; ABUD, S. A. T.; STIPP, A. C.

FFCLRP

Foram analisados por métodos morfológicos e morfométricos os epitélios do palato de fetos de rato. As ratas mães foram submetidas durante a gestação a ra-

dição de rf em 20 mhz, e a gradientes de campo magnéticos. A radiação eletromagnética tinha uma potência de 7.4 mW e, a razão de absorção específica(SAR) ou seja, a quantidade de energia por unidade de tempo depositada por unidade de massa do animal foi de 30 mW por kilo. Com estas condições experimentais foi observado que os fetos alternavam a espessura da camada basal de dois tecidos epiteliais. Dentro dos estudos morfométricos realizados, este resultado associado as outras observações nos permitem concluir, que a radiação eletromagnética aplicada as ratas mães ao interagir com as células destas camadas epiteliais influenciaram na orientação destas células.

Distribuição Fluorescente de um Derivado de Hematoporfirina em tecido normal de rato

COLUSSI, V. C.

Pós-Graduação em Neurociências - FCM/UNICAMP

NICOLA, E. M. D.

FCM/UNICAMP

NICOLA, J. H.

Instituto de Física "Gleb Wataghin"/UNICAMP

A Terapia Foto-Dinâmica (PDT) com Derivado de Hematoporfirina (HpD) é amplamente utilizada para Diagnóstico e Tratamento de tumores malignos. O Diagnóstico é baseado na fluorescência conseguida através da excitação, com luz UV, das moléculas de HpD retido pelas células do tecido. Normalmente associamos a malignância do tecido pela intensidade da fluorescência observada após a injeção de HpD. O tecido normal pode mostrar fluorescência devido ao HpD autógeno, e também, devido à retenção temporária do corante nas moléculas. Este efeito é de curta duração, e a fluorescência, não autogênica, desaparece mais rapidamente do que o observado em tecidos malignos. Neste experimento, estudamos a ação da fluorescência em tecidos normais dos rins, intestino e estômago de ratos Winstar, previamente injetados com 10mg/Kg de HpD, via veia Retro-Orbitária. A excitação, das moléculas, foi feita através de uma lâmpada UV($\lambda=365\text{nm}$;20W-Sanyo), e a fluorescência foi observada diretamente em local escuro. Foi observado após 3 horas da injeção do HpD, que tecidos normais do intestino, estômago e rins, apresentaram fluorescência bastante acentuada. Após 24 horas, observou-se fluorescência acima de tecidos de áreas parenquimais e nódulos linfáticos. Uma semana após a injeção, somente áreas isoladas de tecidos malignos, apresentaram fluorescência acentuada. Acreditamos que nosso experimento pode contribuir para um melhor entendimento da retenção de moléculas do HpD por diferentes tecidos.

[APOIO: FAPESP]

APLICAÇÕES DE LASER DE Ho:YLF EM ODONTOLOGIA: TESTES in vitro.

ZEZELL, D. M.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares- CNEN/SP

EDUARDO, C. DE P.; CECCHINI, S. C. M.

Faculdade de Odontologia- Universidade de São Paulo

A utilização clínica de lasers em odontologia para tratamento de tecidos moles é uma opção efetiva de terapia que reduz o sangramento e dor dos pacientes durante e depois da cirurgia em comparação a técnicas convencionais. Os lasers mais empregados nestes casos são: Nd:YAG ($\lambda= 1,06 \mu\text{m}$), CO_2 ($\lambda= 10,6 \mu\text{m}$) e He-Ne ($\lambda= 632 \text{nm}$). A interação destes lasers com tecidos duros (como o esmalte dos dentes) entretanto, não é eficiente, uma vez que a água e a hidroxiapatita, principais absorvedores deste tecido, apresentam forte absorção apenas acima da região dos $2 \mu\text{m}$. A emissão laser de Hólmio codopando matrizes de YLiF_4 em $2,067 \mu\text{m}$ coincide com um pico de absorção da água e sua interação com o tecido afeta apenas as camadas mais superficiais, o que o torna excelente para cirurgias em cartilagens e tecidos duros. Realizamos testes in vitro com dentes humanos frescos e secos com o intuito de verificar a possibilidade de utilizar um laser de Ho:YLF para preparo cavitário. Observamos que a irradiação em $\lambda= 2,067 \mu\text{m}$ em dentes, na região oclusal, com pulsos de $300 \mu\text{s}$ (FWHM) de duração com energia de 700mJ por pulso e 30 pulsos por posição, produziram perfurações com cerca de 4mm de profundidade, com bordas limpas e sem carbonização. As microestruturas do esmalte e dentina foram avaliadas através de microscopia óptica e microscopia eletrônica de varredura. Trabalho parcialmente financiado pela SCTDE/SP e RHAE.

ANÁLISE DA EFICIÊNCIA DE APARELHOS PARA FOTOPOLIMERIZAR RESINAS ODONTOLÓGICAS

SILVA, I. R.; DURAN, J. E. R.

USP-Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto

VINHA, D.

USP-Faculdade de Odontologia de Ribeirão Preto

Neste trabalho foram caracterizados cinco fotopolimerizadores, Visilux2, Resilux, Fibrilux, Translux e Primelite. Inicialmente foram obtidos os espectros de emissão das cinco fontes de luz com um monocromador,

e a estes espectros foram ajustadas funções gaussianas, que originaram uma função matemática característica para cada uma das fontes de luz. Foi obtido também o espectro de absorção ótica da resina composta microparticulada utilizada, no intervalo de 600-350 nm do espectro eletromagnético, e observou-se que havia uma absorção maior para comprimentos de onda menores. Foram calculados os valores dos coeficientes de atenuação linear para as lâminulas, através da relação $I = I_0 \cdot e^{(-\mu \cdot x)}$, e para as amostras de resina, através da relação $I = I_0 \cdot e^{(-2\mu \cdot x_1 - \mu_a \cdot x_a)}$, e observou-se que para uma mesma fonte de luz, haviam variações dos valores do coeficiente de atenuação linear para as diferentes espessuras, tanto para as lâminulas como para as amostras, concluindo-se que $\mu = \mu(x)$. As fontes de luz utilizadas foram ordenadas de acordo com a sua eficiência na polimerização da resina, através dos valores de dureza calculados com os dados fornecidos pelo Consistômetro de Hoppler, durante a polimerização da amostra, na seguinte ordem: Visilux2, Translux III, Resilux, Fibrilux, Primelite.

Biosorção de metais por algas

CARVALHO, R. P. DE
UFMG

A biosorção pode ser usada para extrair ions metalicos de soluções aquosas, sendo eficiente para resolver problemas de poluição ou extração de metais preciosos. Foram utilizadas as algas marinhas *Ascophillum nodosum* e *Sargassum natans* para sorção de soluções de Cu, Zn e Cd. A capacidade sortiva para cada metal foi comparada, sendo notada a ordem $Cu > Cd > Zn$. A seguir foi estudada a sorção de soluções contendo dois metais entre Cu, Cd e Zn, analisando-se a influencia da presença de um metal na sorção de um segundo metal e a existencia de sorção "preferencial". Foi observado que Cu inibe a sorção de Zn e Cd e que Cd inibe a sorção de Zn. A diminuição da sorção total quando existem dois metais quando comparada à sorção de soluções contendo um só metal indica que as funções de sorção para esses metais se superpõem. (trabalho realizado na McGill University - Montreal, Canada)

*Workshop: Modelagem Molecular
(BIO, CRI, POL) - 10/06/94*

MOLECULAR MODELLING

PREVOST, M.

Univ. Libre de Bruxelles, Av Paul Heger P2, CP 160, 8-1050 Bruxelles, Belgium

The formation and stability of the structure of globular proteins are of importance for their role in enzymatic reactions and ligand transport molecules. A central question in understanding the protein stability is how the amino acids along the polypeptide chain conspire with each other and the solvent to specify a unique globular structure in face of the many degrees of freedom. It is essential to understand the energetics of the three-dimensional structure adopted by proteins and the properties that control the highly cooperative nature of the formation of the native structure. The careful evaluation of the thermodynamics of the folding process is a first step in answering these questions. Since in water-soluble proteins most of the nonpolar groups are not exposed to the water solvent, hydrophobic interactions are believed to play an important role in the stabilization of proteins as they do in the case of an oil drop in water. Hydrophobicity is estimated by measuring the free energy of transferring apolar solutes from organic solvents or the vapor phase to water. Spectroscopic and calorimetric measurements have shown that the thermal unfolding of proteins displays similarities with this transfer process, in particular with regard to the temperature dependence of the free energy change. Surprisingly, the molecular mechanism for hydrophobicity is still a matter of discussion. For quite a long time, it has been ascribed to the ordered water surrounding the non-polar solute. This is however not confirmed by computer simulation studies and cannot explain the thermodynamic data over a broad range of temperature. Another argument is that the essence of hydrophobicity is in the difference in the work of cavity formation in water and non-aqueous solvents. Since the apolar solute transfer process is different from the protein folding process, it is not evident that the free energy changes measured in the former process are applicable to the latter. Then in order to measure the contribution of the hydrophobic effect on the stability of globular proteins, "non-disruptive" mutations were made wherein a large hydrophobic amino acid is replaced by a smaller one. These experiments showed that the change in the unfolding free energy change upon such mutation is highly variable but generally larger in magnitude than those expected from the solute transfer experiments. Theoretical analyses should be helpful in providing a better understanding of how the hydrophobic effect contributes to the stability of native proteins. Methods for computing free energy changes using MD or MC are rather well suited. Free energy simulation methods are used to analyze the destabilizing effect on the protein barnase of two hydrophobic mutations Ile96 into Ala and Val. Comparisons of the results with experimental measures and with conclusions based on structural and thermodynamic data lead to further insight into the origins

of the stability differences induced by those mutations. In an effort to assess the importance of the cavity formation in the phenomenon of hydrophobicity, free energies of cavity formation are computed in proteins and compared with those in water and organic solvents. Two different techniques are used: 1- MD simulations are carried out with a repulsive potential describing the cavity interaction and 2- configurational data from simulations on proteins are used to obtain the free energy of formation of naturally occurring cavities.

DE NOVO LIGANDS DESIGN

MAIA, E.

Departamento de Química, UnB, CP 152928, 70910, Brasília, DF

O químico medicinal muitas vezes, no curso de seu trabalho, deve apresentar novas estruturas que possuam determinada atividade biológica. Nas empresas farmacêuticas, condicionadas pelo fator tempo, milhares de novos compostos são sintetizados pela simples substituição de grupos funcionais, passam à etapa de testes farmacológicos e resultam em um grande percentual de moléculas inativas, fracamente ativas e/ou pouco seletivas. É certo que ocorre também o inverso. Para muitas classes de atividade, as moléculas sintetizadas apresentam uma grande variedade em suas estruturas químicas e os dados sobre suas atividades biológicas são bastante limitados. A diversidade nas estruturas químicas torna bastante difícil a identificação das partes dos compostos que fazem parte dos fármacos e quais as que podem ser substituídas. Isto sem se considerar a dificuldade de identificação da conformação bioativa. Dificultando ainda mais a elaboração destas moléculas, há o fato de que raramente o receptor é conhecido e que poucas características tridimensionais das interações ligantes-receptor podem ser incluídas para a análise da atividade farmacológica. O problema da análise da flexibilidade conformacional, mesmo quando ela é realizada ao interior do sítio ativo, pode ser longo e infrutífero. Sabe-se também que a estrutura cristalina muitas vezes não é a bioativa, e que a conformação do inibidor interagindo com a enzima é diferente da estrutura cristalina (M. F. Hibert & al, 1988). As informações obtidas através das bases de dados bi ou tri-dimensionais, hoje existentes, não são suficientes para ultrapassar a todos estes problemas (entre outros) o que tem conduzido à criação de programas que modificam as moléculas já existentes (Y.C. Martin & al, (1989), P. Bartlett, & al, (1992)), mesmo a partir de fragmentos moleculares (H-J.Bohm, (1992), (1993)), ao interior do sítio ativo ou, em sua ausência, utilizando-se como referência uma molécula de conhecida atividade. Tendo em vista o largo campo de interesse na criação de ligantes de proteínas, com forte atividade e propriedades seletivas, gostaria de apresentar uma vista sobre os conceitos e algoritmos que estão sendo utilizados para a concepção de novos medicamentos, assim como a sequência, ao menos idealizada, de como estes programas, fonte de idéias para a criação de moléculas originais (De Novo Ligands Design), mas cujos conceitos não envolvem um conhecimento imediato da atividade, podem ser injetados em programas de análises estatísticas avançadas e em "expert systems", para que a atividade do composto criado possa ser prevista (S. Clementi, (1993), V. Golander, (1993)).

A ESTRUTURA CRISTALINA DA ENZIMA GLUCOSAMINA-6-FOSFATO DEASMINASE A 2.1Å DE RESOLUÇÃO

HORJALES, E.; FONTES, M. R. M.; GARRATT, R.; OLIVA, G.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP.

ALTAMIRANO, M.; CALCAGNO, M.

Depto. de Bioquímica, Facultad de Medicina, Univ. Nacional Autónoma de México, Apartado 70-159, 04510, México, D.F., México.

Glucosamina-6-fosfato desaminase catalisa a conversão reversível de D-glucosamina-6-fosfato (GlcN6P) em D-fructose-6-fosfato (Fru6P) e amônia. A enzima, que tem sido identificada em vários outros microorganismos e tecidos animais, é um homopolímero hexamérico com subunidades de 29.7kDa, e exibe uma intensa cooperatividade homotrópica modulada alostericamente por (GlcNAc6P). Glucosamina-6-fosfato desaminase de *E. coli* foi cristalizada no grupo espacial R32 com parâmetros de rede $a = b = 125.9 \text{ \AA}$ e $c = 223.2 \text{ \AA}$. A determinação estrutural procedeu-se pelo método da substituição isomorfa de átomos pesados, com derivados de platina e mercúrio. O mapa de densidade eletrônica apresentou claras fronteiras moleculares e foi então refinado por técnicas de nivelamento do solvente com fases estendidas até 2.5 \AA de resolução. A interpretação foi feita com o programa gráfico "O". A

enzima cristaliza-se com dois monômeros na unidade assimétrica e 230 dos 266 resíduos de cada monômero cristalograficamente independente foram identificados no mapa sem ambiguidades. Os 36 resíduos remanescentes foram encontrados nos mapas de densidade eletrônica subsequentes. O refinamento do modelo com os dados a 2.1 Å foi feito com a técnica de "simulated annealing" com fator R final de 18% com 222 moléculas de água incluídas. O enovelamento do monômero de G6PDA inclui uma folha- β pregueada de 7 fitas, oito hélices- α e uma hélice-3₁₀. O hexâmero tem simetria local 32, com dois trimeros empacotados frente-a-frente com uma rotação relativa de 15° em torno do eixo de ordem 3 e ligados por pontes salinas e interações hidrofóbicas. A determinação da estrutura de uma segunda forma cristalina hexagonal P622, na ausência de fosfato, permitiu a identificação das mudanças conformacionais associadas à regulação alostérica e as estruturas de complexos com ativador e inibidor indicam o provável mecanismo catalítico e alostérico.

Apoio financeiro de CNPq, FAPESP e PADCT/SBIO.

Métodos Teórico-Computacionais em Biofísica (BIO) – 10/06/94

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE HIDROCARBONETOS AROMÁTICOS CANCERIGENOS

CAMILO JUNIOR, A.

USP - IFQSC

GALVÃO, D. S.

UNICAMP - IFGW

Sabe-se desde a década de 1930 que certos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH - polycyclic aromatic hydrocarbons) tem a propriedade de induzir carcinogênese química, quando aplicados sobre a pele ou injetados na corrente sangüinea do organismo, entre outras. Muitos modelos foram propostos na tentativa de correlacionar índices eletrônicos e a atividade carcinogênica destes PAH. Neste trabalho investigamos a existência de uma correlação entre a topologia da estrutura eletrônica e a atividade carcinogênica para um conjunto de PAH [1] usando o modelo de Hückel e os conceitos de densidade de estados total e local (DOS - density of states e LDOS - local density of states). Observamos a existência de uma correlação direta entre a DOS e a LDOS em regiões específicas das moléculas dos PAH e seu poder carcinogênico.

[1] - J. Gayoso e S. Kimri, *Int. J. Quant. Chem.*, **38**(1990), 461; **38** (1990), 487

TRANSFERÊNCIA DE CARGAS EM MACROMOLÉCULAS BIOLÓGICAS: ESTUDO DA FLUORESCÊNCIA DO TRIPTOFANO

GOLDMAN, C.; PIQUINI, P.; PASCUTTI, P. G.; ITO, A. S.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O triptofano (trp) é um dos amino-ácidos cujas propriedades de fluorescência são empregadas no estudo da estrutura de peptídeos e proteínas. Os tempos de vida do estado excitado do trp são determinados levando-

se em conta a competição entre processos radiativos e não radiativos através dos quais a molécula volta ao estado fundamental. Um dos processos não radiativos é a transferência de carga entre sítios diferentes na molécula, que por sua vez dependeria de fatores estruturais como a existência de diferentes rotâmeros para o trp. Derivamos expressões para a taxa de transferência de elétrons em função de parâmetros como a energia de ionização e geometria da molécula, dentro da aproximação de Born-Oppenheimer. Para a parte vibracional da molécula usamos a teoria clássica de Marcus e para o elemento de matriz da parte eletrônica usamos a Expansão Perturbativa Renormalizada. Através de cálculos de mecânica molecular determinamos possíveis configurações de equilíbrio para a molécula de trp. Para cada uma destas configurações calculamos as propriedades eletrônicas dos estados fundamental e excitado através de um cálculo Hartree-Fock-CISD *ab-initio* all-electron. Os orbitais moleculares são obtidos via combinação linear de orbitais atômicos, usando uma base gaussiana STO-3G. A distribuição eletrônica e os autovalores de energia, obtidos através do cálculo de primeiros princípios, assim como os valores das coordenadas atômicas, são utilizados para o cálculo das taxas de transferência de carga. Os resultados são comparados com os dados de fluorescência.

CONTROLANDO UM OSCILADOR BIOLÓGICO PERIODICAMENTE FORÇADO

SILVA FILHO, A. C. DA; MELLO, M. A. DE
USP

O coração é um dos osciladores biológicos mais estudados, sendo que vários pesquisadores têm procurado modelos nos quais enquadrar o seu comportamento. Uma determinada função analítica, particularmente, foi encontrada há alguns anos por Leon Glass e outros. Esta função foi usada para se construir um mapeamento de Poincaré, o qual foi iterado para predizer os efeitos de um conjunto de estímulos periódicos. Vários comportamentos, alguns associados ao coração normal, outros a patologias, foram obtidos. O que fizemos foi sobrepor ao primeiro um segundo conjunto de estímulos e

observar os resultados. A motivação provém do fato de que, no coração normal, a ação de focos ectópicos, por exemplo, pode conduzir a comportamentos anormais. Usando um marca-passo, pode-se, muitas vezes, controlar estas anormalidades. O nosso segundo conjunto de estímulos estaria, portanto, fazendo o papel do marca-passo nas nossas simulações. Obtivemos alguns resultados positivos, conseguindo reverter algumas destas anormalidades.

SIMULAÇÕES DE DINÂMICA MOLECULAR DO PEPTÍDEO α -MSH NA INTERFACE MEMBRANA/ÁGUA

PASCUTTI, P. G.; ITO, A. S.

Instituto de Física - USP

MUNDIM, K. C.

Instituto de Física - UFBA

BISCH, P. M.

Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho-UFRJ

α -MSH é um hormônio peptídeo relevante para a pigmentação. Admite-se que sua ação ocorra pela interação com receptores específicos na membrana celular, supondo-se que a fase lipídica

imponha ao hormônio a estrutura adequada para a ligação com o receptor. Sua passagem da fase aquosa para a fase lipídica é observada experimentalmente, sendo acompanhada de mudanças conformacionais. Neste trabalho investigamos a passagem do α -MSH para a fase lipídica, monitorando mudanças em sua conformação através da simulação de sua dinâmica na interface membrana/água. Foi utilizado um programa computacional para modelagem molecular, atualmente em desenvolvimento pelos autores, onde o solvente é simulado por um contínuo dielétrico. A interface entre o meio aquoso (constante dielétrica = 80) e a membrana celular (constante dielétrica = 2) é simulada por uma superfície

de descontinuidade dielétrica. O termo coulombiano de interação entre átomos não-ligados é modificado de maneira a considerar contribuições de cargas-imagens devido à presença da interface. O efeito da carga-imagem sobre a própria carga não é considerado, desprezando-se desta maneira efeitos diretos do solvente sobre a molécula. Entretanto, a somatória de todas as interações entre resíduos

atômicos de cargas, nessas condições, leva a uma força resultante perpendicular à interface. O sentido desta força, seja apontando para o meio aquoso ou para o meio hidrofóbico, dependerá da distribuição de cargas na molécula e das distâncias entre elas. São apresentados

resultados que mostram a passagem do α -MSH para o interior da membrana pelo deslocamento de seu centro de massa com relação à interface e pela diminuição em sua energia potencial. É monitorada sua mudança conformacional através do cálculo dos valores médios dos

ângulos diedrais antes e após atravessar a interface. Os desvios dos valores desses ângulos informam, adicionalmente, sobre a flexibilidade rotacional da molécula nas ligações químicas correspondentes.

ESTUDO SOBRE O MOVIMENTO DE BACTÉRIAS MAGNETOTÁCTICAS

NOGUEIRA, F. DE S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

BARROS, H. G. P. L. DE

Museu de Astronomia e Ciências Afins - MAST

Sabe-se que existem na natureza microorganismos capazes de se orientarem passivamente a um campo magnético externo. Tais microorganismos são ditos magnetotáticos. Estes microorganismos possuem essa propriedade porque em seu interior encontram-se cadeias cristalinas de material magnético (magnetita, por exemplo) que fornecem a célula um momento de dipolo magnético permanente. Desde sua descoberta muitos trabalhos envolvendo movimento ou análise por microscopia eletrônica foram feitos. Os trabalhos sobre movimento normalmente limitam-se a análise experimental das trajetórias obtidas em microscopia ótica onde utiliza-se normalmente o modelo de C. Bean. Contudo, o modelo de C. Bean despreza o forte padrão helicoidal exibido pelas trajetórias típicas de muitos microorganismos magnetotáticos, especialmente as bactérias. Sabe-se, porém, que o caráter helicoidal da trajetória de muitos organismos desempenham papel importante na orientação dos mesmos. Como em geral acredita-se que a magnetotaxia é uma vantagem biológica, no sentido em que os microorganismos magnetotáticos ao orientarem-se no campo magnético migram rapidamente para regiões menos oxigenadas, é importante estudar que tipo de influência o padrão helicoidal da trajetória exerce neste mecanismo de orientação. Neste trabalho propomos um modelo que leva em conta esta característica tão comum na trajetória desses organismos. O modelo proposto generaliza o modelo de C. Bean e permite acessar novos parâmetros do movimento. Argumentamos que o forte padrão helicoidal observado em trajetórias típicas, principalmente no caso de bactérias, pode ser uma importante vantagem biológica complementar a orientação magnética.

MODELO DE SENSOR DE FLUTUAÇÕES DE CARGA ELÉTRICA

LIMA, N. F.

CEFET-Ba/UFUSP

Em outro trabalho apresentado a este Encontro (1), discutimos os aspectos termodinâmicos da operação cíclica de um sistema que adquire informação sobre flutuações de concentração de uma espécie química, a utiliza para bombear a espécie contra a diferença de concentração,

e finalmente descarta essa informação. Neste trabalho propomos um circuito resistivo-capacitivo, análogo elétrico do modelo de acesso alternado, que bombeia carga segundo o ciclo proposto. A flutuação da carga e o chaveamento do circuito são tratados como processos brownianos, descritos por equações de Langevin. O movimento de um sensor de carga controla o estado de uma chave interruptora; o sensor interage com a carga flutuante, e está submetido a um potencial de perfil conveniente (cujos mínimos correspondem aos estados da chave). Além disso está sujeito ao ruído do meio, que na membrana celular é uma superposição de ruído branco com componentes determinísticas ou aleatórias fora do equilíbrio. O modelo permite tratar o descarte de informação e a medição em termos de propriedades elétricas conhecidas da membrana. Estamos presentemente empenhados em simular numericamente o modelo, explorando a capacidade que o modelo possui de extrair energia, para o descarte, de ruído fora do equilíbrio. Essa é uma possibilidade muito interessante de acoplamento entre processos fora do equilíbrio, que pode ser efetiva em processos biofísicos (2,3), especialmente os que ocorrem na membrana celular. Ref.: 1 Lima, N.F. et al. "Transporte iônico e processamento de informação num demônio de Maxwell de interesse biológico" 2 Astumian, R.D et al. Phys Rev A 39, 6416 (1989) 3 Tsong, T.Y Annu Rev Biophys Biophys Chem 19, 83 (1990)

Biofísica Teórica e Computacional (BIO) - 10/06/94

ESTRUTURA DOS ATRADORES EM UM AUTÔMATO PARA O CONTROLE DE GENES.

SALES, J. A. DE; MARTINS, M. L.

Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa

Um dos problemas da biologia moderna é entender como a expressão de genes específicos é controlada nos eucariotas em relação aos processos vitais de proliferação, diferenciação e desenvolvimento de padrões organizacionais e sua continuidade durante a vida de cada espécie. Se um gene está para ser ativado, várias proteínas como fatores de transcrição devem ligar-se em um segmento do gene alvo, chamado promotor, e desencadear a sua expressão. Esta atividade de indução de um gene não é um fenômeno isolado no interior da célula. O que se observa são múltiplas interações gênicas, quer dizer, indução ou repressão de determinados conjuntos de genes formando uma rede em que cada "sítio" é capaz de influenciar "positiva" ou "negativamente" outros "sítios de contacto". Assim o efeito

final é o resultado dessas interações desencadeadas, inicialmente, pelo estímulo extracelular que gerou a resposta efetuada na célula. Neste trabalho estudamos a dinâmica de um modelo de autômatos celulares para o controle de genes que envolve interações assimétricas locais (regulação "in cis"), e de longo alcance (regulação "in trans"), autoregulação e diluição. A evolução da estrutura dos atradores no espaço de fase em função do número de genes é investigada. Em particular, o crescimento do período médio, do número de diferentes atradores e a estabilidade à mutações de cada um desses atradores é analisada. Uma possível relação com o paradoxo do valor C-DNA é discutida.

EFEITOS DO MICROAMBIENTE CELULAR EM UM MODELO DE CRESCIMENTO DE CÂNCER

BOSCHETTI, S. R.; MARTINS, M. L.

Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa.

VILELA, M. J.

Departamento de Biologia Animal - Universidade Federal de Viçosa.

O câncer é um dos mais terríveis fenômenos de crescimento em biologia. Sua progressão envolve uma sequência de alterações que ocorrem dentro do sistema neoplásico, provocando uma série de lesões qualitativamente diferentes. Encarado como um complexo processo de múltiplos estágios a progressão não é obrigatória. Ao nível molecular, o surgimento de um tumor envolve cinco ou seis passos independentes (mutações), sendo que cada um deles representa uma barreira fisiológica a ser superada, de modo que a célula transformada possa progredir até o estágio final de malignidade. Neste trabalho propomos um modelo de crescimento de câncer no qual o tecido é representado por uma rede quadrada e cada etapa de progressão do tumor corresponde a um tipo celular, a saber, normal, anormal, aberrante e atípico. Inicialmente, todos os sítios da rede são ocupados por células normais com exceção de seu centro, onde existe uma única célula anormal. O processo de crescimento ocorre a partir de uma célula escolhida ao acaso, com igual probabilidade, dentre todas as células da periferia do tumor. A célula escolhida pode sofrer uma divisão celular e ocupar o lugar de uma vizinha normal, com probabilidade $P_i(\text{div})$, ou sofrer uma transformação celular (progressão) em direção a um nível crescente de malignidade, com probabilidade $P_i(\text{prog})$, ou se mover para fora do tumor invadindo o tecido normal, com probabilidade $P_i(\text{mov})$, ou, finalmente, morrer e ser substituída por uma célula normal, com probabilidade $P_i(\text{morte})$. As características dos padrões de crescimento resultantes são investigadas em função dos diversos jogos de probabilidades P_i . Também o efeito do microambiente devido a fatores autócrinos (secretados pelas próprias células tumorais) e parácrinos (produzidos pelo tecido

normal) sobre a morfologia do tumor é avaliado.

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DIGITAL PARA OBTENÇÃO DE CARIÓTIPOS HUMANOS

PINTO, C. D. A.; ROBILOTTA, C. C.
Instituto de Física - USP

A classificação de cromossomos humanos (cariotipagem) é uma ferramenta importante no diagnóstico de doenças genéticas. Atualmente esta tarefa é realizada de modo manual, pois o custo de sistemas comerciais para classificação automática os torna proibitivos para muitos laboratórios de citogenética. Com a finalidade de agilizar o processo de classificação, estamos desenvolvendo um sistema automático para análise de cromossomos humanos usando microcomputadores IBM/PC. Para isto estamos aplicando a teoria da Morfologia Matemática (MM) (Serra, 1988), que estuda mapeamentos entre reticulados completos, onde as imagens binárias e em níveis de cinza são casos particulares. A MM permite descrever uma linguagem baseada em mapeamentos elementares, erosão, dilatação, anti-erosão e anti-dilatação (Banon e Barrera, 1992), que são usados para elaborar mapeamentos mais complexos. O trabalho apresenta 2 etapas: desenvolvimento dos protótipos dos algoritmos e sua implementação em um microcomputador IBM/PC. Para o desenvolvimento dos protótipos adotamos o sistema KHOROS, um ambiente de linguagem visual e desenvolvimento de software para processamento de imagens desenvolvido pela Universidade do Novo México para estações de trabalho. A etapa de implementação dos algoritmos consiste em desenvolver uma máquina morfológica em um microcomputador IBM/PC 486, utilizando linguagem C e o ambiente Windows. Embora as imagens binárias sejam um caso especial das imagens em níveis de cinza, elas apresentam algumas características que permitem uma redução no custo computacional. Deste modo os algoritmos para imagens binárias exploram o paralelismo intrínseco das operações lógicas AND e OR do processador. Para o caso das imagens em níveis de cinza, as operações básicas são realizadas através de translações do elemento estruturante (subconjuntos do quadrado elementar) sobre a imagem. Em ambos os casos a imagem é dividida em regiões que são tratadas por diferentes métodos, de modo a otimizar o desempenho. Nós desenvolvemos uma seqüência de mapeamentos que quando aplicados em imagens digitalizadas de cromossomos, resultam em uma pré-classificação útil para o diagnóstico.

Apoio financeiro: CNPq.

TRANSPORTE IÔNICO E PROCESSAMENTO DE INFORMAÇÃO NUM "DEMÔNIO DE MAXWELL" DE INTERESSE BIOLÓGICO.

LIMA, N. F.; HENRIQUES, V. B.

IFUSP

ARAÚJO, J. P. DE

ICB-USP

O "modelo do acesso alternado" (Lauger) de transportador de íons através de membranas biológicas pode ser tratado como um "demônio de Maxwell" (DM), que adquire e processa informação sobre flutuações microscópicas de concentração iônica. Seu funcionamento não contraria a segunda lei da termodinâmica, na medida em que é necessário, para que opere ciclicamente, descartar informação antiga. Esse passo, segundo a resolução recente que Landauer e Bennet deram ao problema do DM, implica na redução da entropia do DM e do meio sobre o qual ele age, e exige por isso a participação de um corpo externo, o qual aumenta compensatoriamente sua entropia. No presente trabalho vamos mostrar uma adaptação do modelo do acesso alternado ao esquema proposto por Bennet e Landauer, e demonstrar que a taxa de produção negativa de entropia, referente ao fluxo iônico, é em valor absoluto sempre menor que a taxa de produção positiva, necessária para que se processe o descarte de informação. Vamos ainda calcular a eficiência do transporte nesse modelo e compará-la com a do modelo padrão. Ref.: Lauger, P. Phys Rev 67, 1296 (1987) Landauer, R. Sci Am 253, 48 (jul 1985) Bennet, C. Sci Am 257, 108 (may 1987)

DESENVOLVIMENTO DE UMA INTERFACE GRÁFICA PARA VISUALIZAÇÃO MOLECULAR

CASSIANO, M. M.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

BISCH, P. M.

Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho, Universidade Federal do Rio de Janeiro

A visualização de estruturas moleculares consiste em uma das etapas fundamentais no estudo de modelagem molecular. Através de imagens criadas na tela do computador, torna-se possível uma análise detalhada das estruturas tridimensionais das conformações moleculares. Além de fornecer um método de análise de estruturas conhecidas, a visualização molecular tem se mostrado extremamente útil na interpretação de resultados obtidos em simulações de dinâmica molecular pois, através dela, uma quantidade muito grande de dados pode ser mais facilmente investigada. Este trabalho objetiva o desenvolvimento de uma interface gráfica que permita, através de um conjunto de

utilitários e rotinas, a visualização de estruturas moleculares, bem como o acompanhamento de simulações de dinâmica molecular.

O programa para a criação desta interface, em desenvolvimento em estações da Silicon Graphics do Laboratório de Sistemas Integráveis da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, está sendo escrito em linguagem de programação "C", fazendo uso da biblioteca gráfica "GL" (Graphics Library).

A visualização é obtida através de arquivos contendo tipo atômico, posições e ligações químicas dos átomos que compõem as moléculas. Atualmente estão sendo utilizados resultados do programa THOR de simulação de mecânica e dinâmica molecular (Mundin et al, XVI-ENFMC, Caxambu, 1993, p. 101), os quais são convertidos em diferentes representações geométricas, selecionadas pelo usuário, de acordo com suas necessidades. A interface oferece também algumas possibilidades de interatividade com o usuário, de modo que transformações de rotação, translação e escalonamento possam ser facilmente efetuadas.

Estão em andamento estudos para uma representação visual adequada de membranas biológicas, cuja interação com moléculas de interesse vem sendo estudada através do programa THOR (Pascutti et al, XVI-ENFMC, Caxambu, 1993, p.90).

FORMULAÇÃO TERMODINÂMICA DE NÃO-EQUILÍBRIO APLICADA AO ESTUDO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE

LOPES, F. J. P.; BISCH, P. M.

IBCCF-UFRRJ

COSTA, M. C. P.

UFMA

As estruturas são obtidas a partir de experimentos de osmocentrifugação em células de diálise, que possuem uma interface, membrana semi-permeável, a qual permite o acoplamento osmótico. A colocação adicional de uma amostra concentrada de proteína leva a uma estruturação espacial, que tentamos caracterizar como um estado estacionário de não-equilíbrio. De acordo com a formulação local da teoria termodinâmica de não-equilíbrio obtivemos o termo fonte de entropia e as equações fenomenológicas com uma dependência linear entre fluxos e forças termodinâmicas, estas últimas sendo a força externa, o tensor de viscosidade e as diferenças de potenciais químicos. A partir dessas equações de fluxos, da equação de conservação da massa e da equação de movimento obtivemos cinco equações diferenciais descrevendo o sistema, que são a relação de incompressibilidade, o balanceamento da massa dos componentes e as três componentes da equação de Navier-Stokes para o sistema. Atualmente estudamos o equilíbrio mecânico do sistema, caracterizado por gradientes de velocidade e fluxos nu-

los, e consideramos a osmose aplicando-a como condição de contorno para as soluções das equações diferenciais. Numa descrição mais completa pretendemos estudar estados estacionários com campo de velocidade e força externa.

Físico-Química Biológica (BIO) - 10/06/94

ESTUDO DA ONDA METACRONICA UTILIZANDO-SE MÉTODOS DE MICROSCOPIA ELETRONICA DE VARREDURA E LUZ ESTROBOSCÓPICA.

ARAGÃO, P. H. A.

UEL

SILVEIRA, M.

IFUSP

Cílios são projeções celulares filamentosas, dotadas de movimento próprio e constituídas por um conjunto de microtúbulos, chamado de complexo 9+2. Movimentam-se de forma bem característica, apresentando uma fase de batimento efetivo, seguida de uma fase de recuperação. Este movimento resulta de reações mecano-químicas que ocorrem dentro da organela. Estudamos as ondas metacronicas, ondas que se propagam na superfície do animal, utilizando-se métodos de M.E.V. O que tornou possível medir o comprimento de onda de micro-turbelário de água doce, 3,5 μm para algumas espécies. Para registro da frequência ciliar, fizemos uso de uma célula fotosensível, capaz de captar a luz emitida pelo sistema acoplado microscópio óptico/estroboscópico. Tal dispositivo permitiu se estudar detalhadamente a frequência do batimento ciliar em função da variação da viscosidade do meio, 15,6Hz para organismos se movendo em água filtrada do meio.

TRANSIÇÕES DE FASE EM BIOMEMBRANAS : MODELOS NA REDE E VARIÁVEIS DE GRASSMANN.

NOGUEIRA, F. DE S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

VIEIRA, F. DE M. C.

Universidade Federal de Viçosa

É bem conhecido experimentalmente que bicamadas de lipídios (constituintes básicos das biomembranas) apresentam transição de uma fase gel para uma fase cristal líquido. Vários modelos teóricos tem sido propostos nos últimos vinte anos com o objetivo de elucidar diversos aspectos relacionados a esta transição de fase. Dentre os modelos mais populares encontra-se o modelo de Nagle⁴. A proposta do modelo de Nagle é simplificar o

problema até o ponto em que este se torne exatamente solúvel sem, contudo, que se perca a física essencial por detrás da transição de fase em questão. O modelo assume um mapeamento da conformação das cadeias de hidrocarbonos em um problema de dímeros compactados em duas dimensões. Extensões deste modelo para o caso tridimensional tem sido estudadas com o objetivo de corrigir algumas deficiências da solução bidimensional. Neste trabalho estudamos a transição de fase em um modelo de dímeros compactados em três dimensões. Para tal fim empregamos a técnica de integrais em variáveis de Grassmann desenvolvida por Samuel^a. Com esta técnica reproduz-se facilmente os resultados de Nagle, obtidos pelo método de Pfaffianos. Já no caso tridimensional, onde não há uma solução exata, é necessário aplicar métodos perturbativos. Estudamos, em primeira aproximação, soluções tipo Hartree. Em particular, para o caso bidimensional, é feita uma comparação da solução Hartree com o resultado exato. Propostas de aproximações autoconsistentes e renormalização de vértices são discutidas.

^aJ. Chem. Phys.; 58, 252 (1973)

^bJ. Math. Phys.; 21, 2806 (1980)

MODELO PARA A MICELIZAÇÃO DE SUBSTÂNCIAS ANFÍFILICAS

ANTENEDO, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Estudamos a autoagregação de moléculas anfífilicas mediante um modelo tipo gás de rede, onde os sítios da rede podem ser ocupados por uma molécula anfífilica ou por um aglomerado de moléculas de água. A molécula anfífilica, constituída de duas porções de diferentes 'polaridades' é representada por um 'dipolo', caracterizado pela sua orientação na rede. São consideradas somente interações entre sítios primeiros vizinhos.

As interações atrativas e repulsivas entre 'dipolos' ou entre um 'dipolo' e um aglomerado de moléculas de água são dependentes da orientação relativa dos 'dipolos' que participam da interação.

Mediante simulações de Monte Carlo, considerando redes bi e tridimensionais periódicas, podem ser obtidas informações sobre a micelização, como, por exemplo, a concentração micelar crítica e a distribuição de tamanhos dos agregados, dependentes dos parâmetros do modelo: concentração de moléculas anfífilicas e temperatura.

ENERGIA DE INTERAÇÃO LATERAL DOS LIPÍDEOS

FORNÉS, J. A.

Instituto de Matemática e Física Universidade Federal de Goiás

A Energia total de interação lateral versus a distância de interação intermolecular para um gás bidimensional

é obtida a partir do diagrama de fases na região de baixas densidades. A fórmula obtida considera a flutuação relativa do número de moléculas, σ_R :

$$\sigma_R = \frac{\sigma_N}{\sigma_{ideal}} = \sqrt{-\frac{kT}{a^2 \left(\frac{\partial \Pi}{\partial a}\right)_T}} \quad (2)$$

onde k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta. A área disponível per molécula a , e a derivada da pressão lateral Π com respeito a esta área $\left(\frac{\partial \Pi}{\partial a}\right)_T \Rightarrow \left(\frac{\partial \Pi}{\partial a}\right)_T$ podem ser obtidos do diagrama de fases construído com uma balança de Langmuir. O método é aplicado a quatro lecitinas.

SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO PARA UM MODELO COM MICELIZAÇÃO - EFEITO DO TAMANHO DA CADEIA CARBÔNICA.

BERNARDES, A. T.

UFOP

HENRIQUES, V. B.

USP

Estudamos um modelo para a solução de moléculas anfífilicas em água, que consiste de uma mistura de polímeros anfífilicos e monômeros (água), numa rede quadrada, com interações hidrofóbicas e hidrofílicas de curto alcance e com interação de volume excluído representada pela rede subjacente. Em trabalho anterior, mostramos que o modelo, no caso de trímeros ($n=3$), apresenta comportamento característico de micelização: um patamar na curva de anfífilicas livres e uma transição na curva de distribuição de tamanhos de uma fase oligomérica para uma fase micelar. Neste trabalho, consideramos diferentes tamanhos de polímeros, no intuito de verificar o efeito de tamanho da cadeia carbônica (n) sobre a concentração micelar crítica, sobre a energia livre das micelas e sobre a distribuição de tamanhos das mesmas.

CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DE SOLUÇÕES DE ÁCIDO RIBONUCLEÍCO SINTÉTICO POLI(I)-POLI(C) COM CONTRAÍONS MONOVALENTES

FOSSEY, M. A.; MINHACO, G. A.; RUGGIERO NETO, J.

Depto. de Física-IBILCE-UNESP-S.J. do Rio Preto

O estudo das propriedades dos polieletrólitos de polinucleotídeos sintéticos, que são modelos mais simplificados dos ácidos nucleicos, tem sido de grande interesse para a biologia molecular, pois o comportamento dos ácidos nucleicos nos organismos vivos é fortemente determinado pelo caráter polieletrólítico destas macromoléculas. O estudo das propriedades coligativas de

soluções polieletrólíticas, tem contribuído para compreender alguns dos mecanismos envolvidos na interação entre ácidos nucleicos e o meio iônico. Dentre as técnicas utilizadas no estudo de propriedades de transporte de soluções polieletrólíticas, a condutometria tem-se mostrado muito poderosa, não somente pela simplicidade e acuidade, mas principalmente pelas informações que podem ser obtidas. Entretanto a potencialidade destes métodos não tem sido amplamente explorado no estudo de polieletrólitos em solução, principalmente por que o comportamento da condutividade molar (Λ) no limite de diluição infinita não estar bem estabelecido. Neste trabalho são apresentados os resultados referentes ao estudo da dependência da condutividade (σ) e da condutividade molar (Λ) com a concentração (φ) de solução de sal de ácido ribonucleico (RNA) sintético poli(I)-poli(C) de diferentes contraíons monovalentes. É também estudada a validade da relação de Eisenberg para diferentes concentrações de polímero, assim como a dependência do coeficiente de condutividade f com a concentração C_p e a espécie do contraíon. Na análise destes resultados são utilizadas as teorias limites (para diluição infinita) desenvolvida por Manning e Eisenberg.

(Apoio: FAPESP, CNPq)

ENOVELAMENTO DE PROTEÍNAS : ALGORITMOS GENÉTICOS E MUTAÇÃO.

VIEIRA, F. DE M. C.; MARTINS, M. L.

Universidade Federal de Viçosa

O enovelamento de proteínas continua sendo um problema fundamental em biologia, físico-química e física estatística. A questão central é : como estas macromoléculas selecionam rapidamente uma única conformação dentre um conjunto astronômico grande de possibilidades? Uma das linhas de investigação sobre o assunto consiste em modelos de rede (quadrada, cúbica, diamante, etc.) em duas e três dimensões. Outra simplificação usual é assumir a existência de apenas dois tipos de aminoácidos : hidrofóbicos (H) e polares (P). A energia associada a cada conformação é devida apenas aos contatos entre os aminoácidos do tipo H. Recentemente, Unger e Moulton^a propuseram uma estratégia de simulação para estes modelos, baseada no conceito de algoritmos genéticos, mais rápida do que as do tipo Monte Carlo usual em, pelo menos, uma ordem de grandeza. Além disto, frequentemente, os programas resultantes são capazes de encontrar conformações de mínima energia não alcançadas por outros métodos. Neste trabalho, o comportamento de um programa para enovelamento de proteínas baseado na idéia de algoritmos genéticos é investigado. Várias de suas características são analisadas, entre as quais : velocidade de convergência (incluindo comparações com métodos Monte Carlo), distribuição de energia, influência de "temperatura" e "congelamento". Como

aplicação, estudamos o efeito de mutação na cadeia proteica, visando compreender a estabilidade de conformações nativas frente a alterações em um pequeno número de aminoácidos.

^aUnger, R. & Moulton, J.; *J. Mol. Biol.*, 231 (1993), 75-81

ANÁLISE CONFORMACIONAL DE CADEIAS POLIMÉRICAS APLICADA AO ÁCIDO POLIGALACTURÔNICO

RUGGIERO, J. R.

Depto de Física - IBILCE - UNESP - São José do Rio Preto

URBANI, R.; CESÀRO, A.

Università degli Studi di Trieste - Itália

No tratamento de polieletrólitos usualmente é assumida a separabilidade da energia devido ao polímero em duas contribuições: uma conformacional, de curto alcance e, outra, a eletrostática entre os grupos carregados existentes. Esta última tratada através de modelos simplificados (1). O objetivo do presente estudo é introduzir a influência dos grupos carregados na conformação do próprio monômero e discutir como esta se propaga na simulação de cadeias poliméricas, usando, particularmente, o ácido poligalacturônico como modelo. Assumindo a aproximação quase "linkage independent" mostramos que a extensão da cadeia (calculada pela razão característica C_∞) com o grau de ionização (α) passa por um mínimo ao redor de $\alpha = 0.5$ (2). Esse não é o comportamento obtido nos tratamentos usuais, nos quais a geometria e cargas parciais não variam com a ionização com exceção do próprio grupo ionizado que ganha ou perde uma carga elementar, e a repulsão coulombiana expande o polímero. Apresentamos, ainda, resultados que justificam a aproximação assumida considerando as modificações produzidas na topologia das superfícies de energia dos dímeros (base do processo de simulação das cadeias poliméricas) a partir de seqüências diversas de oligômeros ($n = 3, 4$ e 5).

(1) Manning, G.S.; *J.Chem.Phys.*, 51,24 (1969) Cleland, R.L. *Macromolecules*, 17, 634 (1984)

(2) Ruggiero, J.R.; Urbani, R. & Cesàro, A. "Conformational features of Galacturonans: Configurational Statistics of Pectin and Pectic Polymers" a ser submetido.

Apoio CNPq.

SIMULAÇÕES MONTE CARLO DE UM MODELO DE REDE NO ESTUDO DA FORMAÇÃO DE MICELAS DE ANFIFÍLICOS IÔNICOS NA PRESENÇA DE SAL.

VENEZIANO, A. L.; CHAHINE, J.; FEITOSA, E.

INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS, LETRAS E CIÊNCIAS EXATAS DE SÃO JOSÉ DO RIO PRETO-SP - UNESP

HENRIQUES, V. B.

INSTITUTO DE FÍSICA - USP

BERNARDES, A. T.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE
FEDERAL DE OURO PRETO

Estudamos a agregação em estruturas micelares de anfílicos iônicos na presença de sal. As moléculas distribuídas em uma rede quadrada são formadas por três monômeros, um deles representando a cabeça polar hidrofílica eletricamente carregada e os outros dois a cauda hidrofóbica. Dois tipos de interações competem: a de curto alcance, de caráter hidrofílico ou hidrofóbico, e a interação coulombiana blindada, expressa pelo potencial de Debye-Hückel. Comparamos os resultados com simulações de anfílicos neutros. Nota-se que a interação eletrostática introduz dinâmica em temperaturas que, no caso não-iônico, congelam o sistema, alterando a concentração micelar crítica e polidispersividade.

Apoio: CNPq (ALV, JC E EF) e FAPESP: Projeto Temático (EF)

EQUILÍBRIO DE MEMBRANA APLICADO A VESÍCULAS CATIÔNICAS

BENATTI, C. R.; FEITOSA, E.

INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS, LETRAS E CIÊNCIAS
EXATAS DE SÃO JOSÉ DO RIO PRETO-SP - UNESP
PROCÓPIO, J.
INSTITUTO DE CIÊNCIAS BIOLÓGICAS - USP - SÃO
PAULO

Anfílicos (lipídio, detergente) são moléculas contendo uma região hidrofóbica e outra hidrofílica que, quando hidratados, organizam em estruturas do tipo micelas, bicamadas ou vesículas. As vesículas, ao contrário das micelas, possuem um ambiente interno de compartimentalização e têm uma estrutura de bicamada semelhante à matriz de fosfolípidios. Estas estruturas têm grande importância em aplicações tecnológicas e servem como modelos para o estudo de membranas biológicas. Vesículas unilamelares de Cloreto de Dioctadecildimetilamônia (DODAC) foram obtidas por sonicação a banho e utilizadas no estudo de equilíbrio de membrana para obter uma medida direta da fração de contra-íons ligados (β) à superfície das vesículas. Separadas por uma membrana de diálise, colocamos soluções de vesículas de DODAC 20 mM e NaCl 2 mM; após o equilíbrio, a dosagem dos íons na solução e solvente levaram a $\beta = 0,88$; 0,80 foi obtido por eletroforese. A diferença pode ser atribuída à passagem de fragmentos de bicamada anfílica da solução para o solvente, fenômeno também observado neste trabalho. O efeito das concentrações de anfílicos e de sal em β estão sendo investigados.

Apoio: Instituto de Hematologia de Rio Preto, Projeto Temático FAPESP (EF), FAPESP (CRB) e CNPq (EF).

FASES DISPERSAS NA REGIÃO DE BAIXA CONCENTRAÇÃO DE SURFACTANTE DO SISTEMA TERNÁRIO APFO/D₂O/NH₄Cl

OURIQUES, G. R.

UFSC

Várias técnicas experimentais tem sido utilizadas no estudo de fenômenos de auto-agregação molecular frequentemente encontrados nos sistemas vivos e em sistemas aquosos, em misturas de dois ou mais componentes (geralmente surfactante e água). Neste trabalho, microscopia polarizante, microscopia eletrônica de transmissão, condutividade elétrica e NMR foram utilizados na tentativa de identificar "fases dispersas" presentes no sistema ternário APFO/D₂O/NH₄Cl, na região do diagrama de fase com baixa concentração de surfactante e alta concentração de sal (NH₄Cl). Nesta região do diagrama de fase, estas dispersões foram identificadas como sendo formadas de uma estrutura lamelar de dimensão finita (lamelas fragmentadas em "água contínuum") e uma estrutura vesicular (multilamelar) polidispersa com dimensões variando de 1 μ m a 35 μ m (vesículas gigantes).

Vesículas gigantes tem sido encontradas em sistemas vivos, entretanto, esta é a primeira vez que são observadas em sistemas não vivos e sem a ajuda de qualquer método especial para produzi-las, isto é, são formadas espontaneamente na solução.

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE POISSON-BOLTSMANN COM SIMETRIA PLANA PARA QUATRO ESPÉCIES DE ÍONS.

TESO, A.; DRIGO FILHO, E.; AGOSTINHO NETO, A.
INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS, LETRAS E CIÊNCIAS
EXATAS DE SÃO JOSÉ DO RIO PRETO-SP UNESP

Usa-se a equação de Poisson-Boltzmann (P-B) para estudar um sistema composto de uma membrana plana, carregada imersa em solução iônica, contendo quatro espécies de íons distintas (1:2:1:2). Neste caso, a equação de P-B é escrita como:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \lambda \sum_{i=1}^4 \exp(-z_i\phi);$$

onde: n_i é o número de íons do tipo i por unidade de volume, onde o potencial se anula, Z_i , a valência do íon i , $\phi = \frac{q\phi}{\kappa T}$ (ϕ é o potencial elétrico), $\lambda = \frac{n_0 l^2 q^2}{\epsilon \kappa T}$ sendo que; n_0 é o número de avogrado, l é um comprimento arbitrário que vale $10^{-10}m$, q^2 a carga do elétron (1.6×10^{-19}), $\epsilon = K\epsilon_0 = 78.5 \times 1.38 \times 10^{-23}$ e T a temperatura absoluta. Esta equação fornece a forma do

campo elétrico e do potencial elétrico respectivamente por:

$$\frac{dx}{d\xi} = (x-1)\sqrt{2\lambda n_4((x-1)^2 + (b+2)(x-1) + a+b+1)}$$

onde: $u = x - 1$ e $x = \exp \phi$,

$$\phi = \ln[\sqrt{d} \cosh[aux(\xi)] - e + 1]$$

sendo que;

$$aux(\xi) = \ln \left[\frac{(v_2 - v_1)}{\left[\frac{(v_0 - v_1)}{(v_0 - v_2)} \exp(\beta(\xi - \xi_0)) - 1 \right]} + v_2 \right]$$

onde: $\beta = \sqrt{\left[\frac{\lambda n_4}{2} d (v_1 - v_2)^2 \right]}$, $v_0 = \exp(\alpha_0)$, $v_1 = \frac{e}{\sqrt{d}} - \sqrt{\left(\frac{e}{\sqrt{d}} \right)^2 - 1}$, $v_2 = \frac{e}{\sqrt{2}} + \sqrt{\left(\frac{e}{\sqrt{d}} \right)^2 - 1}$, $e = \frac{(a_3+4)}{2}$, $d = \frac{-(a_3-2)^2}{4} + 3 - a_2$ e $\xi = 0$. A partir destes resultados analisa-se graficamente várias situações variando as concentrações dos íons.

CRESCIMENTO, CARACTERIZAÇÃO E PROPRIEDADES DOS MATERIAIS

Propriedades e Caracterização I
(CCP) - 08/06/94

OPTICAL SPECTROSCOPY OF Cr^{3+} IONS IN $KZnF_3$.

PILLA⁺, O.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

$KZnF_3 : Cr^{3+}$ is a good material for a vibronic solid state laser, and true cw laser operation was achieved at room temperature in the near infrared. In this fluoride, Chromium ions substitutes for Zn^{2+} in a perfect cubic site. Because of charge compensation centers in tetragonal and trigonal sites have been also observed, whose competing absorption affects the lasing efficiency.

A complete characterisation of the optical properties of the emitting chromium ions has been obtained with the aim of several experimental techniques, including Time Resolved Spectroscopy, Fluorescence Line Narrowing, and the application of high hydrostatic pressure at very low temperature.

⁺ Professor visitante "Università degli Studi di Trento" - Itália

PROPRIEDADES ÓTICA E ESTRUTURAL DE FILMES DE $KBr:Cu^+$

OLIVEIRA, L.; SILVA, M. A. P.; SIU-LI, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

As propriedades óticas e microestruturais de filmes de $KBr:Cu^+$ vêm sendo estudadas devido a sua transparência na região do visível e infravermelho, apresentando uma banda de absorção em 278 nm, cuja meia largura é de 24 nm e coeficiente de absorção em torno de 10^{-4} cm^{-1} , para uma concentração nominal de 1% de $CuBr$. Entre outras características, é possível controlar sua intensidade através da concentração de íons Cu^+ , sem alterar significativamente sua posição e meia largura, levando certo interesse aplicativo, como filtro na região do UV. Essa banda é atribuída à posição fora de centro que o íon ocupa na rede cristalina. Neste trabalho, apresentamos uma correlação entre o espectro de absorção e a microestrutura destes filmes, variando a temperatura do substrato de ambiente a 491 K, durante o crescimento do filme. Dos resultados obtemos informações de como produzir filmes de $KBr:Cu^+$ com alta transmitância, baixa densidade de poros e maior absorção em 278 nm.

Absorção do estado excitado de íons de Ni^{2+} em cristais de $BaLiF_3$

MARTINS, E.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; BALDOCHI, S. L.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN-SP
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos

Apresentamos as medidas de absorção do estado excitado em cristais de $BaLiF_3 : Ni^{2+}$. Este cristal apresenta estrutura fluorperovskita cúbica invertida e é um forte candidato a meio laser ativo na região do infravermelho próximo ($1,5 \mu\text{m}$) se enquadrando na categoria de lasers vibrônicos por apresentar bandas largas de absorção e luminescência. Estas bandas, vibronicamente alargadas, são devidas aos íons de níquel incorporados nos cristais, permitindo a sintonização em comprimentos de onda. A determinação da absorção do estado excitado é importante uma vez que tem se apresentado como um fator limitante na operação laser de vários cristais dopados com íons de metais de transição, como por exemplo, em cristais de $KZnF_3 : Ni^{2+}$. Não foi observada absorção do estado excitado significativa na região de bombeio (1150 nm), nem no domínio de comprimentos de onda da suposta emissão laser, somente foi detectada uma forte absorção do estado excitado na região do visível (560 nm).

EFEITOS ANÔMALOS NA EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DO $LiNbO_3$

LIMA, J. F. DE; VALERIO, M. E. G.

UFS

MENDES FILHO, J.; NUNES, F. D.

UFC

O niobato de lítio ($LiNbO_3$) é um material ferroelétrico de grande interesse devido as suas propriedades piezoelétricas, piroelétricas, ópticas e outras. A estrutura cristalina deste material difere da estrutura das perovskitas do grupo ABO_3 dada a semelhança dos raios

iónicos do Li^+ e do Nb^{5+} uma vez que nas perovskitas os íons A e B possuem tamanhos bastante diferentes. No $LiNbO_3$ na fase ferroelétrica, os íons Li^+ e Nb^{5+} são circundados por octaedros distorcidos de O^{2-} e, dada a similaridade dos tamanhos dos cátions e o fato da ligação $Nb^{5+} - O^{2-}$ ser mais forte do que a ligação $Li^+ - O^{2-}$, o niobato de lítio apresenta um acentuado desvio da estequiometria de maneira que $[Li]/[Nb] > 1$ produzindo um material com uma alta concentração de defeitos intrínsecos. No presente trabalho, estamos investigando as propriedades da emissão termoluminescente (TL) de amostras nominalmente puras de $LiNbO_3$ produzidas pela Crystal Tech. As amostras, sob forma de pequenos cristais de tamanhos semelhantes, foram cortadas de um mesmo pedaço de $LiNbO_3$. As curvas de emissão TL das amostras sem qualquer tipo de irradiação já revelaram a presença de um pico em cerca de $67^\circ C$ superposta a um conjunto de emissões rápidas e distribuídas aleatoriamente. Durante o resfriamento da amostra, tanto o pico quanto as emissões rápidas voltam a ocorrer com uma intensidade cerca de 10 vezes menor do que durante o aquecimento. Num segundo ciclo de aquecimento e resfriamento, tanto o pico quanto as emissões são novamente observadas nas mesmas intensidades repetindo-se todas as vezes que a mesma amostra foi relida (em média, cerca de 8 a 10 vezes). Amostras submetidas a diferentes doses de radiação γ apresentaram o mesmo comportamento. Estes efeitos anômalos observados na emissão TL do $LiNbO_3$ sem paralelo com a TL de qualquer outro material conhecido na literatura, ainda não possuem interpretação precisa.

Estudo dos multisítios de ocupação dos íons de terras-raras no GGG.

COURROL, L. C.; GOMES, L.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - São Paulo
PEDRINI, C.

Physico-Chimie des Matériaux Luminescents,
Villeurbanne, France

Os garnets de Gálio $Gd_3Ga_5O_{12}$ dopados com íons de terras-raras são meios laser ativos de qualidade reconhecida e pertencem ao sistema cúbico com grupo espacial O_h^{10} . Os íons de Gd ocupam o sítio dodecaédrico (simetria D_2) enquanto os íons de Gálio estão no sítio octaédrico (simetria S_6) ou no sítio tetragonal (simetria S_4). Neste trabalho foi utilizado o íon de Eu^{+3} como sonda estrutural do GGG onde identificamos os possíveis sítios de ocupação do íon TR^{+3} nessa rede cristalina. Foi possível identificar três sítios de simetria distintos sendo que um deles não pertence ao sítio do garnet. Os espectros de excitação e emissão de alta resolução apresentam um número de bandas estreitas que não correspondem ao esperado para o íon

de Eu^{+3} na simetria D_2 e sim condizentes com dois ou mais tipos de sítios com simetrias D_2 , C_{2v} ou mais baixa. Além disso este estudo mostra claramente que não há evidência espectroscópica de ocupação do sítio S_6 pelo íon de Eu^{+3} substituindo parcialmente os íons de gálio. Obteve-se também os parâmetros do campo cristalino para o sítio "não garnet" (assumido C_2). Apoio Fapesp/CNPq.

EFEITOS DA CONCENTRAÇÃO DO PbO NAS PROPRIEDADES ÓPTICAS DOS VIDROS DO SISTEMA

$Bi_2O_3 - PbO - B_2O_3 - GeO_2$

SOLANO, V. C.; BARBOSA, L. C.; MARTINEZ, E.;
CESAR, C. L.; ARANHA, N.

IFGW/Unicamp

ALVES, O. L.

IQ/Unicamp

CUEVAS, R. F.

IFGW/Unicamp

Preparamos vidros deste sistema fazendo variar as concentrações do PbO de 10 até 60 mol% e GeO_2 de 72 até 22 mol% mantendo fixos os outros dois óxidos. Os compostos foram fundidos em forno de resistência superkanthal na temperatura de $1000^\circ C$ por 30 minutos, vazados e recozidos na temperatura de $300^\circ C$ por 5 horas. Fizemos medidas dilatométricas e de densidade. Os vidros foram submetidos a tratamentos térmicos acima da temperatura de transição vítrea para estudar, mediante raios X, os diferentes estágios no processo de cristalização. Visando aplicações na óptica, foram preparados filmes finos das diferentes composições usando a técnica de assoprimento; através das medidas de transmitância, na região UV-Vis, determinamos a dispersão dos índices de refração linear ajustados na forma da equação de Sellmeier, o coeficiente de absorção, o gap óptico polarizabilidade eletrônica. Utilizando alguns modelos teóricos [1], [2], [3] fizemos estimativas do n_2 (o coeficiente do índice de refração não linear): Os resultados mostram as propriedades ópticas lineares e não lineares neste sistema, são fortemente influenciados pelo PbO .

[1] N. L. Boling, A. L. Glass and A. Owyemg; J. Quantum Elec. QE-14(1978)600.

[2] M. E. Lines, Oxide Glasses for fast photonics switching: A comparative study, J. Appl. Phys 69(10), 15 may 1991.

[3] Reva Garg, Empirical relationship for non linear index coefficient, Applied Optics, Vol. 19, 8, 15 april 1980.

Propriedades e Caracterização II (CCP) - 08/06/94

DIELECTRIC RELAXATION IN PHOTOREFRACTIVE LiNbO(3) :Fe SINGLE CRYSTALS

SOMBRA, A. B.; PAIVA, J. A. C. DE

(1)-Departamento de Física, UFC, C. Postal
6090, Fortaleza, Ce, Brazil

HERNANDES, A. C.

(2)-Instituto de Física e Química de São
Carlos-USP-SP-Brazil

Iron-doped lithium niobate (LBN :Fe) is a ferroelectric material with important optoelectronic and non-linear optical properties (1). Laser induced changes in the index of refraction are responsible for holographic storage in this kind of material. The storage of holograms in LBN:Fe is associated to photoexcitation of free electrons (from the Fe ions) out of the occupied traps and their subsequent recapture by empty traps. The purpose of this paper is the study of the complex dielectric function and pyroelectric coefficient of various Fe concentrations in LBN as a function of frequency and sample temperature (2) Measurements of the real and imaginary parts of the dielectric function revealed the presence of well-defined low frequency relaxation processes in highly doped LBN. The frequency of these resonances increases with decreasing sample temperature. They are also heat treatment and Fe concentration dependent. In summary from the observed general behaviour, the relaxation can be ascribed to aggregates of iron impurities. With a thermal treatment these clusters are broken and the individual ions are dispersed throughout the bulk of the crystal. The study of these low frequency relaxation modes associated with Fe impurities is important in the optimization of LBN:Fe for holographic storage applications.

REFERENCES

- 1- G.E.Peterson, A.M.Glass, T. J. Negrin, Appl. Phys. Lett. 19, 130 (1971) 2- J.A.C.de Paiva et al. Opt. Materials, 1, 59 (1992)

ESTUDO DE INTERAÇÕES QUADRUPOLES EM LIGAS Hg-In

SILVA, P. R. J.; SAITOVITCH, H.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

FORNER, M.

ISKP/UNIV. BONN/RFA

OLZON-DIONYSIO, M.

Departamento de Física, UNIV. FED. SÃO CARLOS

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre a variação com a temperatura (intervalo 20K - TA) dos gradientes de campo elétrico em algumas ligas do sis-

tema Hg-In. Há algumas discrepâncias nas estruturas cristalinas, propostas por diferentes autores para HgIn e Hg₈₀In₂₀^(a, b), que foram duas das sete composições estudadas. O gradiente de campo elétrico é sensível às simetrias da rede e o seu estudo pode ajudar a resolver estas dúvidas. As frequências de interação quadrupolar elétrica (ν_Q) foram medidas pela técnica de Correlação Angular Perturbada no isótopo-sonda ¹¹¹Cd localizado no sítio do In. Os resultados obtidos permitem mostrar uma variação de interação quadrupolar com a temperatura seguindo padrão idêntico ao dos componentes das ligas, ou seja, as frequências $\nu_Q(T)$ decrescem com o aumento de temperatura T, segundo a lei T^{3/2}. Os resultados são consistentes com uma estrutura cristalina ordenada romboédrica tipo CuPt-L1₁ para o HgIn e estrutura ortorrômbica tipo γ -Pu para β -Hg (Hg₈₀In₂₀). Não foi observado o composto intermetálico HgIn₂^c.

^aMascarenhas, Y. P. 1970 *J. Appl. Cryst.* 3 294.

^bSegnini, M. and Giessen, B. C. 1972 *Acta Cryst.* B28 320.

^cMahy, T. X. and Giessen, B. C. 1979 *J. Less-Common Met.* 63 257.

RELAXAÇÃO DIELÉTRICA EM MONOCRISTAIS COM ESTRUTURA TUNGSTÊNIO BRONZE A BAIXA TEMPERATURA

PÓVOA, J. M.

UFSCar

GUO, R.; BHALLA, A.

MRL-PENNSYLVANIA - USA

Permitividade dielétrica a baixa temperatura (15-300K) de monocristais com estrutura Tungstênio Bronze Sr_{1-x}Ba_xNb₂O₆ (SBN(1-x)%) e Pb_{1-x}Ba_xNb₂O₆ (PBN(1-x)%) foram estudadas utilizando-se da espectroscopia de impedância (5Hz - 13MHz). Duas relaxações dielétricas a baixas temperaturas (bem abaixo da temperatura de transição de fase ferroelétrica-paraelétrica) foram observadas nos monocristais de SBN e somente uma foi observada em monocristais similares de PBN. A relaxação observada no SBN no intervalo de temperatura de 150K a 300K é presumivelmente associada a uma transição de fase incomensurada e a observada abaixo de 150K tanto no SBN quanto no PBN é associada à flutuação de polarização no plano perpendicular ao eixo polar. A inhomogeneidade química local nos relaxores ferroelétricos SBN e PBN destrói a simetria translacional global, e perturba a direção da polarização local com relação a simetria macroscópica. Esta perturbação é termicamente ativada de forma que medidas dielétricas pode detetá-la quando a energia térmica é comparável com a barreira de polarização local.

EFEITOS PIEZOELÉTRICOS NÃO LINEARES NO KDP

MELO, F. E. DE A.; MOREIRA, S. G. C.; ARAUJO, J. F. DE; MENDES FILHO, J.; MOREIRA, J. E. DE C.; NUNES, F. D.

UFC

Propriedades não lineares de materiais são de grande importância tanto pelas suas aplicações práticas (1-2) como nos problemas relacionados com as transições de fase (3-4). Em processos de medidas de uma propriedade específica, o primeiro problema consiste em separar a contribuição linear da não linear. Alguns materiais piezoelétricos exibem transições de fase ferroelétrica na qual, o material apresenta uma polarização espontânea para uma dada temperatura crítica chamada temperatura de Curie. Para temperaturas próximas da temperatura de Curie, muitas de suas propriedades físicas apresentam uma dependência anônima com T. Em particular, os coeficientes piezoelétricos podem exibir um comportamento fortemente não linear com a temperatura. Os efeitos não lineares de geração de harmônicos e dobramento de períodos que um ressonador pode apresentar, são explicados pelo modelo do oscilador anarmônico amortecido forçado. Por meio de uma técnica simples, observamos grandes não linearidades no KDP em função da temperatura, frequência e amplitude do campo elétrico aplicado na amostra. As não linearidades de geração de harmônicos e sub-harmônicos (dobramento de período) são explicadas por um modelo fenomenológico microscópico de modos acústicos "soft" e modos ressonantes piezoelétricos acoplados.

1- B.V. Sobolev, B.G. BochKov, V.S. BondorenKo and V.E. Zuev, *Zarubehnaya Elektronika*, 6, (1977).

2- A.K. Gouguly and K.A. Davis, *J. Appl. Phys.* 51, 920 (1980).

3- N.P. Zagrai, L.K. Zarembo, N.R. Ivanov, O. Yu. SerdobolsKaya and L.A. Shuvolov, *Kristallografiya*, 25, 787, (1980).

4- G. Sorge, H. Beige and C. Scheduling, *Ferroelectrics*, 41, 51 (1982).

CARACTERIZAÇÃO DIELÉTRICA E PIROELÉTRICA DE CERÂMICAS FERROELÉTRICAS A BASE DE TITANATO DE CHUMBO

BALTAZAR-RODRIGUES, J.

UEPG

EIRAS, J. A.

UFSCar

Amostras de cerâmicas ferroelétricas de titanato de chumbo modificadas com lantânio, em concentrações de 10, 15 e 20% em mol, dopadas ou não com 1% de manganês, foram preparadas por mistura de óxidos e receberam eletrodos de prata para permitir as medidas

dielétricas e piroelétricas. As medidas dielétricas foram feitas em função da temperatura aquecendo as amostras a uma taxa de até 2°C/min., através de medidas de capacitância com uma ponte universal HP 4260A de 1KHz. As medidas piroelétricas se deram após a polarização das amostras com 3,5KV/mm a 80°C por 0,5 hora. Estas medidas foram realizadas segundo o método proposto por Bayer e Roundy, no qual as amostras são aquecidas uniformemente, a uma taxa inferior a 2°C/min, e a corrente liberada devido a despolarização estimulada pela temperatura é medida com um eletrômetro cuja resistência interna é muito menor que a da amostra. No caso, foi usado eletrômetro Keithley 617 e um sistema automatizado de coleta de dados. Todas as medidas foram feitas até temperaturas superiores às de transição de fase das amostras (Tc). Serão apresentados os resultados verificados nestas medidas e discutida a influência do lantânio nas propriedades e no comportamento ferroelétrico dessas cerâmicas.

INTERAÇÕES HIPERFINAS NO $Y_2Cu_2O_5$

SAITOVITCH, H.; SILVA, P. R. J.

CBPF/CNPq

FORKER, M.

ISKP - BONN UNIV./RFA

WEBERSZPIL, J.

INST. FÍSICA/UFF

Neste trabalho apresentamos um estudo de caracterização por interações hiperfinas do oxocuprato $Y_2Cu_2O_5$, dopado com o isótopo-sonda In^{111} (em quantidade $< 10^{-4}$ at.%) durante o processo de sinterização a partir dos reagentes Y_2O_3 e CuO. As medidas de correlação angular com base na cascata de decaimento nuclear do isótopo-sonda, localizado nos sítios dos Itrios, foram feitas ao ar, no intervalo de temperatura 4,2K-1.300K. Foram medidas as frequências de interação quadrupolar elétrica (FIQE) e os coeficientes de assimetria naquele composto. A célula unitária do $Y_2Cu_2O_5$ possui simetria ortorrômbica com dois sítios distintos para os Itrios localizados no interior de octaedros distorcidos de Oxigênio. Quando em vácuo, o $Y_2Cu_2O_5$ se decompõe em $\approx 600C$ (XV Encontro Nac. Fís. Mat. Cond.); nas condições atuais, no entanto, manteve a sua integridade até $\approx 1.000C$. As diferenças entre as duas FIQE (correspondentes aos dois sítios distintos de Itrio) diminuem com a temperatura, indicando uma provável tendência à equalização dos entornos dos Itrios nos octaedros. Foram realizados cálculos dos gradientes de campo elétrico atuantes nos sítios dos Itrios utilizando o modelo de ponto-carga.

*Termoluminescência, Absorção Ótica,
Propriedades Térmicas e Defeitos
(CCP) - 08/06/94*

**CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS DE
BORATO DE LÍLIO, DOPADOS COM Cu^{2+}
ATRAVÉS DAS TÉCNICAS DE
TERMOLUMINESCÊNCIA (TL),
RESSONÂNCIA DE SPIN ELETRÔNICO
(RSE) E ABSORÇÃO ÓPTICA (AO)**

CHINAGLIA, E. DE F.; NASCIMENTO, M. L. F.;
MATSUKA, M.; WATANABE, S.

Instituto de Física da USP

Foram medidos TL e RSE de vidros de borato de lítio ($xLi_2(100-x)B_2O_3$, $x = 30\text{mol}\%$) dopados com várias concentrações (0.01, 0.02, 0.04, 0.16, 0.26, 0.30, 0.40, 0.60, 1.0, 2.0, 3.0 mol%) de CuO , recristalizados em um forno a $700^\circ C$ onde permaneceram por 10 minutos. A resposta TL destes materiais, irradiados com uma dose de 1 Gy de radiação γ de ^{60}Co , depende da concentração de Cu^{2+} e mostrou um valor máximo em torno de 0.3 mol% de CuO . Notamos que o processo de recristalização aumenta a sensibilidade TL à radiação. As medidas de RSE foram realizadas em amostras contendo 0.16, 0.4 e 1.0 mol% de CuO , antes e após irradiação com uma dose de 1×10^4 Gy. O espectro mostrou um sinal devido ao Cu^{2+} , cuja concentração não muda após a irradiação. Após essa irradiação, foi detectado um sinal devido ao centro de buraco Boro-Oxigênio. Este sinal está sendo analisado e estudado o comportamento da resposta TL e do sinal de RSE num decaimento isotérmico em uma temperatura abaixo da temperatura do pico TL a fim de identificar a estrutura molecular do centro responsável. Foi medida também AO desses vidros sem recristalização para as concentrações 0.01 a 0.26 mol % de CuO e observamos um aumento da altura da banda de absorção com o aumento da concentração de Cu^{2+} . Estão sendo realizadas medidas complementares para outras concentrações, bem como os efeitos devido à irradiação.

**EFEITO DO DEUTÉRIO NAS LIGAS DE
 $a-GeN_x$**

LÓPEZ, J. V.; MARQUES, F. DAS C.
UNICAMP

As ligas amorfas de germânio-nitrogênio hidrogenadas não estequiométricas ($a-GeN_x:H$) tem sido sintetizadas com banda proibida óptica variável entre cerca de 1.0 eV e 3.5 eV. Estes filmes são potencialmente aplicáveis como semicondutores, camada anti-refletora em células solares, camada isolantes em transistores de efeito de campo, entre outras aplicações. Neste traba-

lho apresentamos análises de infravermelho das ligas de germânio-nitrogênio hidrogenadas ou deuteradas não-estequiométricas. Os filmes foram preparados por rf reactive sputtering com um alvo de Ge numa mistura de gases de $Ar + N_2$ com H_2 ou D_2 mediante condições de preparação similares. As bandas de absorção no infravermelho associadas a vibrações dos elementos do composto ligados ao hidrogênio são mudadas quando é usado deutério em lugar de hidrogênio. Este efeito é usado para distinguir as bandas relacionadas às ligações com o hidrogênio das demais ligações. O espectro obtido para $a-GeN_x:H$ depositado na faixa de temperatura de $150^\circ C$ a $300^\circ C$ mostra bandas de absorção de vibrações N-H em torno de 3270 cm^{-1} e 1150 cm^{-1} , correspondente aos modos stretching e bending respectivamente. Nos filmes de $a-GeN_x:D$ as bandas N-H são substituídas pelas bandas N-D mudando as frequências de vibração para 2430 cm^{-1} e 920 cm^{-1} respectivamente. A mudança de frequências é consistente com o fator da raiz quadrada da razão das massas atômicas do D e H. Os filmes preparados em temperatura ambiente mostram contaminação atmosférica espontânea, que tende-se a saturar depois de alguns meses. Várias bandas de absorção surgem na faixa de $2700-3800\text{ cm}^{-1}$ e $1400-1650\text{ cm}^{-1}$. Para designar estas bandas de absorção, uma análise sistemática foi executada usando a evolução dos espectros de infravermelho como função do tempo de exposição à atmosfera.

Apoio : FAPESP e CNPq

**Filmes de Multiestrato de $LiF:NaF$:
Propriedades Termoluminescentes**

MAURÍCIO, C. L. DE P.

Instituto de Radioproteção e Dosimetria - CNEN

NUNES, R. A.; MAURÍCIO, M. H. DE P.; CARMO, L.
C. S. DO

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Os cristais de halogeneto alcalinos são materiais bem conhecidos como hospedeiros de defeitos pontuais, denominados centros de cor. Estes defeitos têm sido estudados, devido às suas aplicações em laser e dosimetria. Particularmente o LiF e o NaF apresentam características que os tornam interessantes para estas aplicações, pois são materiais poucos higroscópicos e hospedam defeitos estáveis à temperatura ambiente. Como não é possível produzir cristais mixtos pelas técnicas convencionais de crescimento de cristais, novos materiais com estrutura e estequiometria diferentes foram obtidos pela técnica de crescimento de filmes finos. LiF , NaF e multiestrato de $LiF:NaF$ (com 10 monocamadas de 2500Å) foram crescidos sobre substratos amorfos de Al, inox e vidro, mantidos a temperatura ambiente e a $300^\circ C$. Estes filmes já foram analisados anteriormente do ponto de vista estrutural e óptico, mostrando que o filme multiestrato de $LiF:NaF$

apresenta características diferentes das devidas à superposição simples de filmes de LiF e NaF. Neste trabalho foram analisadas as características TL destes filmes, irradiados com doses de cerca de 10KGy em uma célula gama. Mais uma vez verifica-se que as características TL do filme multiestrato LiF:NaF não podem ser explicadas por uma simples superposição das curvas TL dos filmes de LiF e de NaF. Os filmes de LiF apresentam curvas similares às de cristais de LiF tanto para substratos de Al quanto de inox. Quando o substrato foi mantido a 300°C, houve diminuição na intensidade dos picos de mais baixa temperatura e aumento nos de mais alta temperatura, quando comparados à emissão termoluminescente dos filmes de LiF crescidos em substratos mantidos à temperatura ambiente. Os filmes de NaF também apresentam respostas TL similares tanto para substrato de Al quanto de inox, mas ambas são de difícil interpretação, pois apresentam grande sensibilidade à luz ambiente. É preciso refazer as medidas, mantendo estes filmes sempre no escuro. Nos substratos de vidro é impossível a visualização dos espectros individuais, pois vê-se apenas a emissão TL devido à irradiação do próprio substrato.

STRESS, COEFICIENTE DE DILATAÇÃO TÉRMICA E MÓDULO DE YOUNG DE a-GeN_x:H

LACERDA, R. G.; LIMA JÚNIOR, M. M. DE; LÓPEZ,
J. V.; MARQUES, F. DAS C.
UNICAMP

Filmes amorfos geralmente apresentam tensões mecânicas que se desenvolvem durante sua preparação. Estas tensões podem ser muito prejudiciais para a fabricação de dispositivos eletrônicos, cuja estabilidade e confiabilidade dependem em parte da intensidade das tensões dos filmes utilizados na sua estrutura. Também importante é o casamento de outras propriedades termomecânicas, como o coeficiente de dilatação térmica e as constantes elásticas, uma vez que os filmes são depositados em temperaturas acima da temperatura ambiente. Neste trabalho apresentamos um estudo sobre as propriedades termomecânicas em ligas de nitreto de germânio amorfo hidrogenado, a-GeN_x:H. Os filmes de a-GeN_x:H foram preparados por rf sputtering e depositados em barras de silício de aproximadamente 25 mm x 3 mm x 400 μm. As medidas de stress foram realizadas à temperatura ambiente utilizando um profilômetro Dektak. A maioria dos filmes possuem stress do tipo compressivo, cuja intensidade depende das condições de preparação e da concentração de nitrogênio. Utilizando filmes depositados em dois substratos diferentes (silício e germânio cristalinos), foram realizadas medidas do raio de curvatura em função da temperatura, utilizando um sistema baseado na deflexão de um feixe de He-Ne. Os resultados foram utilizados para o cálculo do coefi-

ciente de dilatação térmica e do módulo de Young dos filmes de nitreto de germânio com banda proibida variando entre aproximadamente 1 eV a 3 eV.

Apoio : CNPq, FAPESP, SAE/UNICAMP

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE HIDRÓXIDO DE NÍQUEL POR TÉCNICAS FOTOELETROQUÍMICAS

MATIAS, J. G. N.

UFC

JULIÃO, J. F.

UFC E UNIFOR

GORENSTEIN, A.

UNICAMP

O hidróxido de níquel é um material electrocrômico que apresenta grande potencialidade de aplicações tecnológicas em janelas de transmissão luminosa variável. A reação electrocrômica do hidróxido de níquel é uma reação de oxidação-redução reversível em que a forma reduzida é aproximadamente transparente e a forma oxidada é opaca. Neste trabalho é reportado o comportamento fotoeletroquímico de filmes de hidróxido de níquel em solução de KOH 1M, a partir do qual se procura entender como as propriedades eletrônicas desse material, que ocorrem no processo de oxidação-redução, afetam as suas propriedades óticas. Esse estudo é feito a partir de resultados obtidos, concomitantemente, por espectroscopia fotoeletroquímica e espectroscopia ótica de absorção. Foi verificado que na fase reduzida o hidróxido de níquel apresenta um "gap" de energia de 3,7 eV e na fase oxidada um "gap" da ordem de 1,6 eV.

FINANCIAMENTO: CAPES E CNPq

PROPRIEDADES TÉRMICAS EM VIDROS DO SISTEMA TeO₂ - Li₂O - TiO₂

CUEVAS, R. F.; BARBOSA, L. C.; SOLANO, S. G. V.
C.; ARANHA, N.; ALVES, O. L.

IFGW/Unicamp

As propriedades térmicas dos vidros da família (95 - x)TeO₂ - xLi₂O - 5Ti₂O₃, onde x = 5, 10, 15, 20, 25, foram estudadas utilizando as técnicas da análise diferencial (DTA) e dilatometria. O efeito da composição nas diferentes propriedades é particularmente notório na expansão térmica que mostra um mínimo na composição com 10 mol% do Li₂O e pode ser indicativo de uma mudança estrutural.

A temperatura de transição vítrea T_g, temperatura de cristalização T_x, temperatura de fusão T_f e temperatura de líquidos T_l foram medidos nos termogramas DTA pela técnica do "onset". As curvas DTA apresentam um pico só de cristalização o qual é relativamente comprido e está relacionado com a taxa de cristalização do vidro. Considera-se que a alta taxa de cristalização observadas nestes vidros é principalmente

uma consequência do processo de fabricação utilizado. A estabilidade térmica de nossos vidros foi calculada a partir da relação $(T_x - T_y)$; observou-se que esta quantidade diminui na faixa de 10 até 20 mol% do Li_2O , indicando que nestas composições ocorre o maior grau de depolimerização da estrutura.

Serão apresentados resultados das diferentes fases encontradas na cristalização dos vidros.

TELEBRAS/FINEP/CNPq.

THERMOLUMINESCENCE DATING OF PERUVIAN ANCIENT POTTERY FROM SOCABAYA, AREQUIPA.

AYTA, W. E. F.; COAQUIRA, J. A. H.; WATANABE, S.

Instituto de Física, USP

BEGAZO, P. C.

Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa, Perú

TATUMI, S. H.

FATEC-UNESP, S. Paulo

A sherd of ceramics of Peruvian indian from region of Arequipa, Peru, was crashed and sieved to retain grains 80 to 180 micrometers diameter. A magnetic separator was used to eliminate as best as possible magnetic and non-TL particles. After washing with sulfuric acid, hydrofluoric acid, distilled water as usual, its natural TL glow curve was obtained (TLN). The glow peak is observed at 600 K. After annealing at 600 °C for 20 min. and irradiating with ^{60}Co gamma-rays, the glow curve presents a very large peak at 400 K besides 600 K peak. The plateau test shows that 600 K peak can be used for dating samples with doses between 0,5 to 100 Gy. The resulting TL curve shows the typical supralinear behavior. This curve was fitted with the function $f(D) = CD(1 - 0,85exp(-aD))^{0,4} + b$ where D=radiation dose, a, b, c, are constants determined from experimental data: $a \simeq 1,489 \times 10^{-2}$ /Gy, $b \simeq 1,664 \times 10^{-2}$ and $c \simeq 2,006 \times 10^{-2}$ /Gy. It was obtained $DAC \approx 1,903 Gy$, and used annual dose of 0,0016 Gy/year an age of ≈ 1190 years was obtained.

DIFUSIVIDADE TÉRMICA DE CRISTAIS DE $BaLiF_3$ EM BAIXAS TEMPERATURAS

SAWADA, L.; DUARTE, M.; BALDOCHI, S. L.;

MORATO, S. P.; VIEIRA, M. M. F.

IPEN - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

O estudo das propriedades térmicas do cristal de $BaLiF_3$ é de grande interesse pois este, quando dopado com íons de metais de transição, apresenta um grande potencial como meio laser ativo, na categoria de lasers vibrônicos. Em particular, o conhecimento da difusividade térmica é importante no crescimento de cristais, na engenharia de lasers e na espectroscopia fotoacústica, entre outras áreas. Neste trabalho foi determinada a difusividade térmica de cristais de

$BaLiF_3$, no intervalo entre a temperatura ambiente e a temperatura de nitrogênio líquido, utilizando o método fotoacústico da diferença de fase. Esse método baseia-se na medida da diferença de fase do sinal fotoacústico gerado ao se iluminar a amostra pela frente e por trás, para uma mesma frequência de modulação. Para garantir que toda luz incidente fosse absorvida na superfície do cristal, satisfazendo as condições do método, foi depositada uma camada de alumínio nas duas superfícies de cada amostra estudada. A determinação da difusividade térmica em baixas temperaturas é importante uma vez que a operação laser nesse material pode ocorrer em baixas temperaturas (apoio FAPESP, CNPq/RHAE).

CHARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DE CENTROS $Pb^{+}(1)$ EM CRISTAIS DE $BaLiF_3:Pb$: ABSORÇÃO DE ESTADO EXCITADO

PRADO, L.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; BALDOCHI, S. L.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-IPEN/CNEN/SP

Centros de defeitos tipo $Pb^{+}(1)$ em cristais de $BaLiF_3:Pb$ vem sendo por nós investigados como um possível meio laser ativo. Esses centros, isoeletrônicos aos centros laser ativos $Tl^{0}(1)$ em KCl, apresentaram ação laser em cristais de perovskitas normais de $KMgF_3:Pb$. Acredita-se que a perovskita invertida de $BaLiF_3$ deva ser mais adequada para a formação de defeitos tipo $Pb^{+}(1)$ mais estáveis em relação aos cristais de $KMgF_3$ pois permitem incorporar a impureza de Pb^{2+} no lugar de um íon da rede de mesma valência. Os centros $Pb^{+}(1)$ em $BaLiF_3:Pb$ foram por nós caracterizados do ponto de vista de absorção fundamental, emissão e tempo de decaimento.

Um dado muito importante para a verificação da viabilidade de um meio fluorescente ser laser ativo é a determinação de seu comportamento quanto à absorção de estado excitado. No presente trabalho são discutidos os recentes resultados obtidos referentes à caracterização espectroscópica de centros $Pb^{+}(1)$ em $BaLiF_3:Pb$ pela técnica de "pump-probe" de absorção rotulada.

Apoio-FAPESP

INVESTIGAÇÃO DA ESTABILIDADE DE DEFECTOS NO $LiF:Mg,Ti$ ATRAVÉS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL ESTÁTICA.

SOUZA, S. S. DE; YOSHIMURA, E. M.; BLAK, A. R. *IFUSP*

Muitas dúvidas ainda restam com relação aos processos de formação de trímeros no fluoreto de lítio dopado com impurezas divalentes. Sabemos que o trímero pode ser

obtido a partir da agregação de três dipolos ou quando um dímero captura um dipolo. As fases intermediárias dos processos de agregação não podem ser identificadas por métodos convencionais de medida de tal maneira que uma estimativa teórica confiável assume uma importância fundamental. Neste ponto, a simulação computacional estática mostra-se eficaz quando permite o cálculo das energias de formação e de ligação dos agregados intermediários e possibilita a comparação entre os resultados. Neste trabalho, investigamos a agregação de dipolos através do programa HADES2 que possibilitou o cálculo das energias de formação e de ligação de dipolos, dímeros e trímeros criados pela inserção de impurezas divalentes (Mg^{2+} , Ti^{2+}). Para a realização destes cálculos foi necessária uma avaliação dos parâmetros do potencial de curto alcance através de ajustes empíricos e através de cálculos explícitos usando um programa baseado no método dos orbitais moleculares.

EFEITOS DA EXPOSIÇÃO A LUZ VISÍVEL, U.V. E RADIAÇÃO γ SOBRE A TERMOLUMINESCÊNCIA DA FLUORITA VERDE.

MELO, A. P. DE; LIMA, J. F. DE; VALÉRIO, M. E. G.
UFS

Neste trabalho realizamos uma caracterização da fluorita verde (CaF_2 natural), proveniente de Criciúma-SC utilizando a técnica de termoluminescência (TL). Após a pulverização e separação granulométrica do pó com diâmetro entre 0.075 e 0.149 mm dividimos a amostra em dois lotes: As amostras virgens e as tratadas termicamente a 600°C submetidas a doses de exposição de luz visível, u.v. e γ do ^{60}Co . Das curvas de emissão termoluminescente observamos que: i.) As amostras virgens apresentam 3 picos de emissão respectivamente nas temperaturas de 120, 180 e 240°C. ii.) As amostras virgens com dose adicional de 200 Gy do ^{60}Co apresentaram além desses picos um primeiro pico próximo de 80°C. iii.) As amostras tratadas termicamente e expostas a radiação u.v. e γ do ^{60}Co revelaram o mesmo conjunto de picos TL das amostras virgens com dose adicional de 200 Gy do ^{60}Co . iv.) Entretanto quando as amostras tratadas são submetidas a exposição da luz visível revelam apenas os 3 últimos picos TL. Os espectros de emissão dos picos TL obtidos na faixa de 300 a 700 nm revelaram a presença de emissões principais em cerca de 340 nm, 380 nm, 480 nm e um conjunto de máximos entre 500 e 600 nm. O tratamento térmico, a irradiação com raios γ e as iluminações com luz u.v. ou visível alteram sensivelmente as intensidades destas emissões para os 4 picos TL da fluorita.

DEFEITOS PONTUAIS NO $BaLiF_3$: UM ESTUDO POR SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS ESTÁTICAS

VALERIO, M. E. G.; LIMA, J. F. DE
UFS

JACKSON, R. A.

Chemical Department - University of Keele

Neste trabalho estamos estudando a formação dos defeitos pontuais intrínsecos e os gerados pela presença de impurezas no $BaLiF_3$ através das técnicas de Simulação Computacional Estática. O $BaLiF_3$ é um material cúbico de estrutura cristalina conhecida como "perovskita invertida" onde os cátions ocupam posições trocadas em relação as perovskitas normais. Ambos os cátions ocupam sítios de simetria O_h porém o número de coordenação para o Ba^{2+} é 12 enquanto que para o Li^+ é 6. O parâmetro de rede vale 3,9950Å próximo do valor do $KMgF_3$. As simulações foram realizadas segundo a estratégia de Mott e Littleton utilizando o programa HADES II. As interações entre todos os pares de íons envolvidos possuem basicamente duas contribuições: as interações coulombianas de longo alcance e um termo de curto alcance tipo potencial de Buckingham que atua somente entre vizinhos mais próximos. Algumas propriedades gerais do $BaLiF_3$ foram reproduzidas com uma boa precisão em comparação com os valores experimentais tais como as constantes dielétricas, e o índice de refração. Analisamos a formação dos vários tipos de defeitos Schottky e Frenkel nesta matriz cristalina e as energias de formação obtidas indicam uma possível coexistência entre defeitos Frenkel aniônico e Frenkel catiônico do Li^+ . Em relação a incorporação de impurezas tais como Pb^{2+} e outros metais nesta matriz cristalina, os resultados parecem indicar uma preferência deste íon pela substituição na posição do Li^+ com compensação de cargas dada via a presença de ânions intersticiais.

ESTUDO DA TERMOLUMINESCÊNCIA DO QUARTZO PARA APLICAÇÕES EM DATAÇÃO ARQUEOLÓGICA

NAVARRO, M. DA S.; VALÉRIO, M. E. G.; LIMA, J. F. DE
UFS

A técnica da Termoluminescência (TL) estuda a emissão de luz por um material durante o aquecimento. A intensidade da luz emitida guarda uma relação de proporcionalidade com o número de portadores de cargas previamente armadilhados que por sua vez esta relacionado com a dose de radiação a que o material foi submetido. Desse modo a TL pode ser utilizada para determinação da dose de radiação acumulada em um dado material o que permite uma imediata aplicação na datação geológica e arqueológica. Entre as peças

arqueológicas de maior importância encontram-se as peças cerâmicas. Uma forma adequada de estudar a datação por peças cerâmicas é estudar a emissão TL dos grãos de quartzo contidos nessas peças. Nesse trabalho foi realizado um estudo da determinação da dose de radiação acumulada em amostras de quartzo recolhidas nas proximidades de restos de fogueiras. As medidas da emissão TL das amostras revelaram a existência de 3 picos, um em torno de 100°C, outro nas proximidades de 150°C e o último por volta de 200°C. Utilizamos o pico em 150°C na determinação da dose acumulada, por ser o mais intenso e não apresentar superposição com a incandescência. Obtivemos uma estimativa da dose de radiação ambiental acumulada pelos métodos da dose adicional e da curva de calibração. Verificamos que o valor estimado por ambos os métodos não coincidiu, como era previsto teoricamente. Suspeitamos que esta diferença se deve ao fato de que o tratamento térmico necessário no método da curva de calibração, esteja mudando a estrutura dos defeitos existentes no quartzo. Com isso, estamos estudando a influência do tratamento térmico na emissão termoluminescente do quartzo. (Apoio CNPq).

**APARELHO LEITOR DE
TERMOLUMINESCÊNCIA POR
CONTAGEM DE FÓTONS:
APRESENTAÇÃO E PRIMEIROS
RESULTADOS**

DIAZ, M. P.; UMISEDO, N. K.; YOSHIMURA, E. M.;
OKUNO, E.

*USP - Instituto de Física - DFN - Laboratório de
Dosimetria*

Existem diversas situações experimentais em que se observa uma intensidade TL muito baixa, dificultando a obtenção de dados de boa qualidade. Podemos citar como exemplos a dosimetria ambiental, a obtenção do espectro da luz TL emitida, a datação por termoluminescência e o estudo de propriedades de materiais com baixa sensibilidade TL. A utilização de um sistema leitor que permita a contagem dos fótons de luz emitidos pelo material, ao invés da intensidade de corrente gerada no detector luminoso é uma das formas de resolver o problema. O equipamento montado no Laboratório de Dosimetria do IFUSP é baseado nesse princípio, sendo seus componentes principais um tubo fotomultiplicador bastante sensível com base que possibilita a resolução de picos de carga, um contador e discriminador de pulsos acoplado a pré-amplificador e um controlador para taxas lineares de aquecimento. O software desenvolvido especialmente gerencia todo o equipamento, permitindo a obtenção de curvas de intensidade de luz em função da temperatura para taxas de aquecimento em uma ampla faixa. Além disso possibilita uma redução preliminar dos dados, com obtenção imediata de altura e posição de pico também com a

subtração da emissão luminosa da panela de aquecimento. São apresentadas as características principais do sistema (relação sinal ruído, tempo morto, sensibilidade, reprodutibilidade...) e curvas TL obtidas com o equipamento em diversas situações experimentais.

**ANÁLISE DA FORMA DE CURVAS DE
EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE
OBTIDAS COM O MODELO DE
INTERAÇÃO DE ARMADILHAS**

SUNTA, C. M.

Atomic Energy Regulatory Board - Bombay

YOSHIMURA, E. M.; OKUNO, E.

*USP - Instituto de Física - DFN - Laboratório de
Dosimetria*

Modificações na forma dos picos de emissão termoluminescente (TL) observadas para fósforos TL em diversas situações experimentais já mereceram inúmeras explicações teóricas. A mais aceita delas atribui às diferentes probabilidades de recaptura na própria armadilha responsável pela termoluminescência os diversos graus de assimetria observados entre a parte inicial do pico (subida) e a sua parte final (descida). Matematicamente isso se traduz em taxas de despopulação de armadilhas com ordens de cinética distintas durante o aquecimento dos fósforos TL. Assim, por exemplo, picos que obedecem à cinética de primeira ordem, têm a meia largura inicial do pico pronunciadamente maior que a da metade final, enquanto que aqueles correspondentes à segunda ordem são praticamente simétricos. Em contrapartida o modelo de Interação de Armadilhas, recentemente desenvolvido por nós, explica as diversas formas de picos TL pela existência de armadilhas profundas (termicamente estáveis até mesmo durante o aquecimento para emissão TL) que participam da captura de portadores de carga liberados durante o aquecimento. Além da forma dos picos TL o modelo explica também a não linearidade entre resposta TL e dose absorvida, observada em muitos materiais TL. São apresentados os resultados de simulações numéricas com o modelo de interação de armadilhas, para diversos conjuntos de parâmetros, a saber: concentrações das diversas armadilhas, seus coeficientes de captura de cargas e a dose absorvida. (CNPq-RHAE)

Workshop: Processos de Preparação de Materiais (CCP, MAT) – 09/06/94

Crescimento de Cristais: Da Física Fundamental à Preparação de Materiais

MESQUITA, O. N. DE

Departamento de Física - UFMG

Um dos objetivos desta exposição neste "workshop" é o de promover um debate sobre a área de crescimento de cristais, seus problemas e perspectivas. Mencionarei abaixo meu ponto de vista, que espero contribua para este debate, no que se refere a questão científica. Diante da necessidade de materiais cada vez mais sofisticados e com propriedades físicas mais específicas para as aplicações tecnológicas das mais variadas, podemos afirmar com segurança, que o tempo glorioso da "cozinha" e do empirismo, já passou! Os fenômenos físicos envolvidos no processo de crescimento de cristais são variados e complexos, uma vez que se trata de um processo fora do equilíbrio termodinâmico. Avanços significativos no entendimento destes processos foram feitos nas duas últimas décadas com a ajuda de computadores rápidos, tanto para resolver equações dinâmicas não-lineares quanto para simulação de processos físicos. Novas técnicas teóricas em Física Estatística de Equilíbrio e Não Equilíbrio foram desenvolvidas, e avanços no problema de estabilidade em sistemas dinâmicos dissipativos, nos permite uma melhor compreensão das estruturas espaciais que se formam durante o crescimento de cristais longe do equilíbrio, a saber o crescimento celular e dendrítico, que definem a microestrutura de muitos materiais, entre estes os metais obtidos por solidificação, e conseqüentemente suas propriedades mecânicas e elétricas. A morfologia de cristais (facetada ou não-facetada) é definida pela estrutura da interface sólido-fluido. Mostrou-se teoricamente, que uma transição de fase tipo Kosterlitz-Thouless, é que define a estrutura da interface e conseqüentemente a morfologia do cristal final. Com o conhecimento da temperatura crítica desta transição, podemos então manipular a morfologia de cristais. Em sistemas mistos, onde a concentração de dopantes deve ser a mais controlada e mais homogênea possível, a interação entre o processo de segregação do dopante na interface e seu transporte na fase fluida, envolve a solução das equações da hidrodinâmica, com toda sua complexidade, usando em geral métodos computacionais e computadores sofisticados. Através destes estudos e que se concluiu que talvez seja preferível se crescer tais materiais em super-gravidade (em ultra-ctrifugas por exemplo) do que em micro-gravidade como é feito nas naves espaciais. As propriedades de transporte e mistura dos dopantes podem ser tremendamente aumentadas, neste caso, por um efeito hoje conhecido como "adveção caótica", onde modulando-se temporalmente de uma maneira conveniente o campo de velocidades do fluido, mesmo no regime laminar, se consegue trajetórias caóticas para as partículas do fluido (e conseqüentemente dos dopantes que são transportados), aumentando a eficiência do transporte e homogeneizando o campo de concentração dos dopantes. Recentemente foi fundada a Sociedade Brasileira de Crescimento de Cristais. Um dos objetivos da SBCC é o de promover uma maior interação entre os pesquisadores da área, bem como o de divulgar de uma maneira didática, estas novas idéias e técnicas, tanto teóricas quanto experimentais, que tem por um lado possibilitado muita pesquisa acadêmica em Física, quanto contribuído para uma preparação mais adequada e controlada de novos e velhos materiais.

CRECIMENTO DE CRISTAIS ÓXIDOS PARA APLICAÇÕES EM DISPOSITIVOS DO ESTADO SÓLIDO.

HERNANDES, A. C.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais/IFQSC/USP

Nos últimos anos o Grupo de Crescimento de Cristais do Depto. de Física e Ciência dos Materiais/USP - São Carlos vem se dedicando à preparação de monocristais óxidos, puros e dopados, para as mais diversas aplicações científicas e tecnológicas. Monocristais volumétricos de LiNbO_3 , de até 40 mm de diâmetro e de 150 mm de comprimento, e LiTaO_3 , de até 30 mm de diâmetro e de 80 mm de comprimento, tem sido crescidos pelo método Czochralski quase que rotineiramente em nossos laboratórios. Um equipamento comercial, com aquecimento indutivo e controle automático de diâmetro, é utilizado para o crescimento destes cristais. Dispositivos de estado sólido estão sendo desenvolvidos em conjunto com diferentes grupos de pesquisa do país. Compostos óxidos da família sillenita, $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (BTO) e $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO), também tem sido preparados para aplicações em holografia. Experimentos sistemáticos de crescimento de BTO e BSO mostraram que um compromisso crítico dos parâmetros de crescimento é requerido para a obtenção de cristais de qualidade óptica. Uma discussão detalhada dos processos de crescimento

destes materiais óxidos será apresentada. Mais recentemente implantamos a técnica de crescimento de fibras monocristalinas óxidas com aquecimento a laser. Essa técnica de crescimento possibilita estudar novas composições de materiais óxidos com baixo custo e muito mais rapidamente (a velocidade de puxamento é sessenta vezes mais rápida que os processos convencionais). Resultados experimentais mostrando a versatilidade desta técnica serão apresentados.

O processo sol-gel: uma técnica recente para preparar materiais avançados com propriedades sob medida

ARGERTER, M. A.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

O processo sol-gel permite a preparação de novos materiais (essencialmente óxidos) cujas funções e propriedades físicas e químicas podem ser praticamente obtidas sob medida. Também com os mesmos produtos de partida pode se obter materiais em diversas formas, tais como fibras, nanopartículas, filmes finos ou espessos, ou produtos sólidos com porosidade variável entre 0 e 99%. Descreveremos genericamente a preparação de um sol, a sua transformação em um gel e finalmente num material acabado. Exemplos específicos obtidos recentemente com aplicações tecnológicas importantes em várias áreas serão discutidos.

DIAMANTE-CVD NA ERA DOS NOVOS MATERIAIS: PESQUISAS E APLICAÇÕES

TRAVA-AIROLDI, V. J.

Laboratório Associado de Sensores e Materiais, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

O presente trabalho evidencia o estado da arte em pesquisa e desenvolvimento na recente área dentro dos novos materiais, que é o Diamante-CVD. O diamante, com suas propriedades físicas e químicas singulares na natureza, está agora ao alcance de todas as áreas do conhecimento, através das técnicas químicas a partir da fase vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition). Apesar de ainda não estar esclarecido, cientificamente, os mecanismos do processo de crescimento de filmes de diamante em baixíssimas pressões e temperaturas relativamente baixas, e por isso ser uma área de intensa investigação básica, já se conhece relativamente bem o comportamento de alguns parâmetros fundamentais de crescimento, de forma que, muitas aplicações, motivadas pelos seus benefícios já são realidade a cerca de 5 anos. A abordagem deste, dará ênfase ao atual estágio da pesquisa e, principalmente mostrará a evolução das aplicações nas áreas de mecânica, eletrônica, biologia, etc., como consequência da simplicidade da engenharia dos processos CVD's. Será dada uma breve descrição de como está o mercado e suas perspectivas para o futuro, principalmente no Japão e Estados Unidos. No Brasil, uma abordagem de como estão evoluindo os trabalhos básicos e quais as perspectivas reais de aplicações a curto, médio e longo prazo, suas características principais e benefícios serão também partes importantes deste trabalho.

Crescimento e Caracterização I (CCP) - 09/06/94

CdTe(ZnTe)/MnTe SHORT-PERIOD SUPERLATTICES: GROWTH, CHARACTERIZATION AND ELASTIC PROPERTIES.

ABRAMOF, E.

LAS/INPE

FASCHINGER, W.; SITTE, H.; PESEK, A.

Linz University - Austria

We report on the growth and characterization of CdTe/MnTe and ZnTe/MnTe short-period superlattices in which the magnetic and diamagnetic layers were varied between 2 and 10 monolayers. In order to obtain a good control of the grown layers in the superlattices, two growth methods were used: atomic layer epitaxy technique for the CdTe and ZnTe layers, and a quadrupole mass spectrometer controlled molecular beam epitaxy for the MnTe layers. The critical thickness of MnTe on both CdTe and ZnTe layers was determined by reflection high energy electron diffraction experiments and the structure of the superlattices was studied by x-ray diffraction analysis. Detailed high resolution x-ray diffraction measurements and the computer simulation of the measured spectra enabled the determination of the zincblende MnTe elastic properties in the superlattices. The knowledge of these properties allowed the growth of a strain balanced CdTe/MnTe superlattices pseudomorphic to a CdZnTe buffer layer. The superlattices exhibited x-ray line widths of about 100 arcsec.

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA DE HETEROESTRUTURAS DE

$Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ e $In_yGa_{1-y}As/GaAs$

LIMA, A. P.; CESCIN, A. M.; QUIVY, A. A.;

SOARES, J. A. N. DE T.; LEITE, J. R.

LNMS - Depto. Fis. Mat. e Mec. - Instituto de Física da USP - São Paulo, SP

Crescemos pela técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) heteroestruturas do tipo poço quântico (QW), multi poço quântico (MQW) e superredes (SR) de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ e $In_yGa_{1-y}As/GaAs$. As larguras dos poços variam de 20 Å a 200 Å. No caso do InGaAs as espessuras dos poços foram mantidas menores do que a espessura crítica (espessura acima da qual o InGaAs começa a relaxar por meio da criação de deslocamentos a partir da interface). Todas as amostras foram caracterizadas por fotoluminescência (PL) a 77 K e fotorefletância (PR) a 300 K e 77 K. Larguras de linha a meia altura (FWHM) obtidas nos espectros de PL mostram valores menores do que 5meV características de amostras de boa qualidade. O espectro de PR a 300 K mostra claramente transições relacionadas com diferentes níveis dos poços, tornando-se ainda mais evidentes a 77 K. Uma comparação das energias obtidas para as transições com as obtidas em artigo já publicado mostram uma boa concordância¹

1) Arent, D.J. et al. J. Appl. Phys. 66, 1739 (1989).

UM MÉTODO PARA A ANÁLISE DO TRATAMENTO DA SUPERFÍCIE DE SEMICONDUTORES USANDO A DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE RAIOS-X.

MORELHÃO, S. L.; AVANCI, L. H.; CARDOSO, L. P.

Universidade Estadual de Campinas, Unicamp

Neste trabalho, apresenta-se um método muito útil para investigar efeitos do tratamento de superfícies em semicondutores, que utiliza casos de três feixes (incidente, primário e secundário) do fenômeno de difração múltipla de raios-X. O feixe secundário nesses casos, é difratado em condições de extrema assimetria, isto é, propaga-se quase paralelamente à superfície da amostra. O método pode fornecer informação a respeito do regime: dinâmico (extinção primária) ou cinemático (extinção secundária), em que a transferência de energia entre os vários feixes ocorre. Sob regime dinâmico, nos semicondutores com grandes regiões cristalinas perfeitas, o método permite investigar a distribuição da desorientação dessas regiões em duas direções: paralela e perpendicular à superfície da amostra. Enquanto a distribuição perpendicular afeta as varreduras $\% \omega$ (rocking curves), a distribuição paralela está relacionada com a rotação das regiões perfeitas no plano da superfície da amostra, afetando a largura dos picos nas varreduras Renninger.

O método é aplicado na análise dos processos de tratamento da superfície de amostras de GaAs(001) e

Ge(001). Os resultados aparecem num diagrama tri-dimensional da intensidade primária como função dos ângulos instrumentais (ω, ϕ) onde o primeiro é o ângulo de incidência e o segundo representa a rotação da amostra em torno do vetor primário. Nas amostras analisadas, observa-se claramente uma anisotropia na distribuição das grandes regiões cristalinas perfeitas em relação às direções paralela e perpendicular.

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE TELURETO DE BISMUTO E LIGAS A PARTIR DE Bi - Sb - Te - Se PARA APLICAÇÕES TERMOELÉTRICAS.

CUSTÓDIO, M. C. C.; RABBANI, S. R.

USP - Instituto de Física

HERNANDES, A. C.; ANDREETA, J. P.

USP - IFQSC - DFCM

Os efeitos termoelétricos são usados na conversão de calor em energia e utilizados como geradores de alta-temperatura ou refrigeradores. Sistemas Bi-Te, ligas binárias e ternárias a partir de Bi-Te-Se-Sb, são os melhores materiais para refrigeração, enquanto ligas de Si-Ge são os melhores materiais para geradores de alta-temperatura. Efetuamos o crescimento de cristais de Bi_2Te_3 tipo-n e tipo-p, utilizando a técnica de refinamento por zona, e de acordo com a caracterização que estamos realizando, pretendemos fazer o crescimento do cristal utilizando Bi-Te-Sb-Se visando otimizar a eficiência deste material. A eficiência é função da potência termoelétrica, da resistividade elétrica e da condutividade térmica. Fizemos análise da composição estequiométrica dos materiais; medimos potência termoelétrica e resistividade elétrica (AC e DC). Sabemos que os materiais são de qualidade razoável, apresentando a composição desejada (levando-se em consideração a precisão da técnica EDS), uniformidade no sentido axial, mas não no sentido radial. As medidas de potência termoelétrica, para material tipo-n, são próximos aos valores encontrados na literatura, assim como os resultados obtidos para resistividade elétrica, para material tipo-p. Com as propriedades termoelétricas medidas, podemos calcular o número de mérito Z e identificar se o material crescido é bom termoelétrico para aplicações em refrigeração.

Criação de defeitos e eficiência da dopagem em filmes de germânio amorfo hidrogenado dopados com Índio.

FAJARDO, F.; COMEDI, D.; CHAMBOULEYRON, I.

UNICAMP

Filmes de germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H) dopados com In foram preparados pela técnica de pulverização catódica a partir de um alvo composto de Ge

cristalino e In, em uma atmosfera de Ar + H₂. Para determinar as propriedades optoeletrônicas dos filmes foram feitas as seguintes caracterizações: espectroscopia de UV-VIS e IR, medidas de condutividade no escuro e medidas de raio-X e Raman. A criação de defeitos nos filmes de a-Ge:H devido à incorporação de In foi investigada pela técnica de "Photothermal Deflection Spectroscopy" (PDS). Como consequência do aumento da concentração de In observa-se um rápido aumento da cauda da banda de valência (Urbach tail) de 60 meV a 150 meV. A incorporação de In foi determinada pela técnica de Rutherford backscattering, encontrando-se que a concentração de In nos filmes (C_{In}) varia linearmente com a relação das áreas entre o In e o Ge no alvo composto. A densidade de defeitos foi estimada a partir da absorção sub-gap medida por PDS em 0.7 eV. Para C_{In} menores de 0.04 %, encontrou-se que a densidade de defeitos permanece constante e que para C_{In} maiores, até 1 %, aumenta linearmente. A variação da eficiência da dopagem é proporcional ao inverso da C_{In} no filme, ao invés da esperada dependência da eficiência da dopagem com $C_{In}^{-1/2}$. Estes dados confirmam o modelo de que a incorporação de átomos dopantes pela técnica de pulverização catódica é um processo de não equilíbrio na superfície do filme em crescimento, em contraste com o que ocorre nos processos de incorporação de átomos de impureza por descarga luminescente.

Apoio FAPESP, CNPq.

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO ÓPTICA DO HEXAMETILDISILOXANO POLIMERIZADO A PLASMA: COMPARAÇÃO COM RESULTADOS TEÓRICOS.

MOTA, R. P.

UNESP/DFQ - Guaratinguetá - SP

DANTAS, S. DE O.

UFJF/Depto. Física - Juiz de Fora - MG

DURRANT, S. F.; CANTÃO, M. P.; GALVÃO, D. S.;

MORAES, M. A. B. DE

UNICAMP/IFGW - Campinas - SP

Filmes finos poliméricos foram obtidos a partir de descarga elétrica, excitada por radio frequência (120 MHz - 40 W) no vapor de Hexametildisiloxano (HMDS). Na produção dos polímeros mantivemos fixa a pressão do vapor do HMDS durante o processo de polimerização em 0,20 mbar e variamos a potência da RF aplicada entre 4 e 34 W. Esta alteração na potência provocou modificações na estrutura molecular desses filmes, evidenciada por espectroscopia a infra-vermelho. Os filmes foram depositados sobre substratos de quartzo e silício e então medidas suas transmitâncias e absorbâncias ópticas, a partir das quais calculamos os coeficientes de absorção desses polímeros, sendo possível definir um gap óptico para esses materiais, cujo valor decresce de

5,25 a 4,76 eV enquanto a potência aumenta de 4 a 34 W. Contomitantemente, uma vez estabelecida a rede polimérica representativa do HMDS polimerizado, foi possível estabelecer o comportamento do gap óptico destes materiais em função da potência. Nestes cálculos levou-se em consideração alterações na densidade de ligações químicas entre Si-H, Si-O e Si-CH₃ para os filmes preparados na faixa de potência especificada, o resultado teórico apresenta a mesma tendência, verificada experimentalmente, de queda no gap óptico neste intervalo de potência.

Crescimento e Caracterização II (CCP) - 09/06/94

Hidrogenação e Microestrutura de Poros em Filmes de a-Ge:H

MULATO, M.; TORRIANI, I. C. L. DE;

CHAMBOULEYRON, I. E.

Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

Nesse trabalho apresentamos resultados experimentais relacionados com a estrutura de microvoids e a hidrogenação de filmes finos de germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H). As amostras foram crescidas por RF Reactive Sputtering (13.56MHz) e foram estudadas como depositadas. Como técnicas de caracterização utilizou-se basicamente espectroscopia de infravermelho e espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS). Resultados preliminares envolvendo o estudo da variação da temperatura do substrato já foram apresentados [1]. Este trabalho não consiste numa otimização das propriedades optoeletrônicas de filmes de a-Ge:H, mas sim em uma compreensão da influência e tendências de alguns dos principais parâmetros de deposição (temperatura do substrato T_s , auto polarização dc do alvo e razão entre pressão parcial de hidrogênio e pressão total) sobre as propriedades finais do filme fino. Os resultados indicam que a altas temperaturas ($T_s > 420K$) o crescimento estrutural é função da mobilidade superficial dos ad-atoms de germânio e do bombardeio energético com íons de argônio, de acordo com algumas sugestões da literatura [2,3]. A hidrogenação parece não afetar a fração volumétrica de voids [4].

[1] M.Mulato, I.L.Torriani and I.Chambouleyron, (XVI ENFMC e 6th BSSP), Braz. J. of Phys., March 1994 (in press).

[2] A.M.Antoine, B.Drevillon and P.Rocca i Cabarrocas, J. of Non-Cryst. Solids, vol. 77-78, 769 (1985).

[3] A.M.Antoine, B.Drevillon and P.Rocca i Cabarrocas, J. Appl. Phys., vol. 61 (7), 2501 (1987).

[4] M.Mulato, I.L.Torriani and I.Chambouleyron, (ICAS15), J. of Non-Cryst. Solids, vol. 164-166, 155 (1993).

Apoio: Fapesp, CNPq.

CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS DE BSO E BTO

CARVALHO, J. F.; HERNANDES, A. C.; GALLO, N. J. H.; ANDREETA, J. P.

USP/IFQSC/DFCM/Grupo de Crescimento de Cristais FREJLICH, J.

UNICAMP/IFGW/Laboratório de Óptica

Os cristais óxidos $Bi_{12}SiO_{20}$ (BSO) e $Bi_{12}TiO_{20}$ (BTO) cristalizam no sistema cúbico com grupo espacial I23 (estrutura sillenita). Por suas propriedades fotorrefrativas encontram aplicações, entre outras, em processamento óptico de sinal, holografia dinâmica e conjugação de fase. Comparados com outros materiais fotorrefrativos, estes cristais são caracterizados por possuírem alta sensibilidade fotorrefrativa e resposta rápida. Suas aplicações requerem amostras com estrito controle de qualidade, como homogeneidade do índice refrativo, uniformidade de densidade óptica e ausência de defeitos espalhadores de luz como inclusões ou "voids". Cristais de BSO e BTO de boa qualidade foram preparados no Grupo de Crescimento de Cristais do DFCM/IFQSC/USP. O BSO foi crescido pela técnica convencional de Czochralski e o BTO pelo método "top-seed solution growth (TSSG)". Experimentos sistemáticos mostraram que um compromisso crítico entre os parâmetros de crescimento é necessário para a obtenção de cristais com qualidade óptica. Estudos por microscopia óptica e eletrônica de varredura, raios-X e interferometria óptica foram utilizados para avaliar a qualidade estrutural e homogeneidade dos cristais. Foram também realizadas medidas de absorção e atividade óptica. Neste trabalho os resultados dos processos de crescimento e caracterização serão discutidos.

ESTUDO DO SILÍCIO POROSO POR DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE RAIOS-X E ESPECTROSCOPIA RAMAN

MORELHÃO, S. L.; HAYASHI, M. A.; MONTES, C. B. P.; CARDOSO, L. P.

Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP

MORAIS, J.

Department of Electrical Engineering, University of North Caroline - Charlotte, NC, USA.

Um método para analisar os efeitos do tratamento da superfície de semicondutores usando o caso de três feixes da Difração Múltipla, envolvendo um feixe secundário de superfície, é aplicado na caracterização do silício poroso. O ângulo sólido em torno das condições simultâneas de difração para as reflexões primária 002 e a secundária de superfície 111 é varrido por um feixe incidente colimado circularmente. As varreduras acopladas $\omega : \phi$ para o silício poroso, mostram que a largura a meia altura na varredura Renninger (ϕ) é sig-

nificamente maior que o seu valor nas varreduras ω , em contraste com o mesmo valor observado em pastilhas comerciais de Si. Esta anisotropia pode ser somente observada com o presente método se as regiões cristalinas perfeitas difratantes, conhecidas como blocos mosaicos, são suficientemente grandes (em torno de 1 μm) para permitir efeitos de extinção primária dinâmica dentro de cada região. Entretanto, grandes regiões perfeitas são conflitantes com a hipótese de confinamento quântico, que atribui os efeitos ópticos à presença de pequenos cristalitos de alguns nanômetros no silício poroso. Informações da espectroscopia Raman para indicar a presença de grandes regiões cristalinas ao invés de microcristalitos no silício poroso, e a possível tensão interna no plano da superfície, são muito úteis e complementam a explicação sobre a anisotropia observada.

ANÁLISE COMPOSICIONAL DE CRISTAIS IV-VI CRESCIDOS EM AMPOLAS FINAS E POR VMS

FABBRI, M.

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Apresentamos um método para análise do perfil axial de composição em cristais de $Pb_xSn_{1-x}Te$, e similares, crescidos em regime difusivo, onde se considera as influências de microsegregação, das condições térmicas externas e a presença de convecção residual na fase líquida. As técnicas são adequadas para o projeto e análise de experimentos feitos em microgravidade, ou em condições que propiciem um regime predominantemente difusivo durante o crescimento. Os efeitos de segregação são tratados por uma técnica de regressão múltipla, baseada na teoria de Smith, Tiller e Rutter e recentemente estendida por Yen e Tiller (J. Crystal Growth 118, 259(1992) e 129, 224(1993)) para englobar efeitos de convecção residual. As influências do perfil térmico e velocidade de deslocamento forno-ampola são levadas em conta por simulações numéricas preliminares, utilizando volumes discretos de controle, e servem para selecionar os dados experimentais adequados aos pressupostos da teoria (regime diluído e equilíbrio interfacial). Desse modo, consegue-se uma boa confiabilidade na recuperação de constantes físicas e parâmetros reais de crescimento, tais como a constante de difusão mútua, a taxa local de segregação, velocidade média de deslocamento da interface e quantidade de convecção residual em termos de um número de Peclet efetivo, no início e no final do crescimento. O método é aplicado a dados experimentais obtidos por crescimento Bridgman em ampolas finas e Vapor-Líquido-Sólido (VMS), e no projeto de experimentos em microgravidade.

**Propriedades Estruturais de InP/GaAs(001)
Utilizando Difração Múltipla de Raios-X.**

AVANCI, L. H.; MORELHÃO, S. L.; CARDOSO, L. P.

Universidade Estadual de Campinas, Unicamp

RIESZ, F.

Res. Inst. for Technical Physics of the Hungarian

Academy of Sciences, Budapest, Hungary

RAKENNUS, K.; HAKKARAINEN, T.

Department of Physics, Tampere University of Technology,

Tampere, Finland

A difração múltipla de raios-x é utilizada para o estudo de propriedades estruturais de sistema heteroepitaxiais de InP/GaAs crescidas por epitaxia por feixe molecular (MBE). Em particular, a largura mosaico das epicamadas e a densidade de deslocamentos tipo 60° na interface camada/substrato são determinadas a partir da simulação dos picos normais e híbridos que aparecem na varredura Renninger para heteroestruturas. O programa de simulação foi recentemente desenvolvido [Solid Stat Commun. (1993) 88(6), 465] no Laboratório de Difração de Raios-X / IFGW Unicamp. A inclinação dos planos (004) da rede da epicamada é determinada em relação ao substrato a partir de varreduras omegas convencionais (Rocking Curves em duplo cristal) e é levada em conta na simulação. São investigadas a influência das condições iniciais de crescimento e do recozimento sobre a densidade de deslocamentos e a inclinação relativa.

ESTUDO COMPOSICIONAL EM CRISTAIS

DE $Hg_{1-x}Cd_xTe$.

SALGADO, E. G. C.; PAGNANO, C. A. G.

AMR/IAE-CTA

FRANZAN, A. H.; AN, C. Y.

LAS/INPE

Os monocristais de telureto de cádmio e mercúrio $Hg_{1-x}Cd_xTe$, são conhecidos pelo excelente desempenho apresentado como semicondutores para detecção de radiação infravermelha na faixa espectral de 8 a $12 \mu m$. Devido aos efeitos de segregação, monocristais desta liga obtidos pelo método de Bridgman apresentam composições longitudinais e radiais não homogêneas, dificultando assim, as suas aplicações na fabricação de dispositivos opto-elêtrônicos. Com o objetivo de estudar a influência do perfil térmico na distribuição do soluto CdTe, foram realizados crescimento de cristais de $Hg_{0.80}Cd_{0.20}Te$ com diferentes gradientes de temperatura na interface de crescimento. Os perfis de composição foram obtidos através de análise por Energia Dispersiva de Raio-X, as quais permitem tanto a construção de curvas de isoconcentração, bem como dos perfis axiais e longitudinais de composição.

Apesar dos crescimentos terem sido realizados em configurações de temperatura e soluto estáveis, os perfis de composição longitudinal dos cristais apresentam um comportamento típico daqueles obtidos com o meca-

nismo de mistura completa na fase líquida.

**CRESCIMENTO DE CRISTAIS EM
MACROGRAVIDADE.**

AN, C. Y.; BANDEIRA, I. N.; FRNAZAN, A. H.;

RUSSO, L. C.

LAS/INPE

ELEUTERIO FILHO, S.; SLOMKA, M. R.

CTI

A qualidade dos cristais crescidos a partir dos processos de solidificação é fortemente influenciada pelos efeitos da gravidade. Por exemplo, no crescimento pelo método de Bridgman Invertido (BI), realizado sob configuração térmica instável, predominam os mecanismos de convecção diferentes daqueles apresentados no método de Bridgman Normal (BN). Devido à existência de uma configuração instável de soluto na interface de crescimento sólido/líquido, geralmente o perfil de composição axial, nos cristais de $Pb_{0.80}Sn_{0.20}Te$, obtidos através de BN, obedece a distribuição dada pela equação de Scheil. Na ausência da gravidade, como nas experiências realizadas em estações orbitais, pode-se estabelecer um mecanismo de crescimento controlado somente por difusão no estado estacionário, possibilitando a obtenção de cristais com maior grau de homogeneidade na composição. Entretanto, experiências no espaço são limitadas tanto pel

**EFEITO DA AMÔNIA NAS
PROPRIEDADES DE TRANSPORTE NOS
FILMES DE a-Ge:H**

CAMPOMANES, R. R.; CHAMBOULEYRON, I.

UNICAMP

Os estudos da dopagem em semicondutores amorfos tornaram-se importantes devido às aplicações tecnológicas do a-Si:H, tais como dispositivos eletrônicos e células solares. Um outro material amorfo é o a-Ge:H, atualmente estudado, sendo de interesse conhecer suas propriedades ao dopar este material. Neste trabalho, discute-se as propriedades de transporte dos filmes dopados de a-Ge:H, usando amônia (NH_3) como gás dopante na câmara de deposição. Os filmes foram preparados pela técnica rf-sputtering numa atmosfera de $Ar+H_2+NH_3$, como alvo foi utilizado c-Ge ultrapuro. O parâmetro que variou-se foi a pressão parcial de amônia na faixa de $(3 \times 10^{-6} - 1.5 \times 10^{-4})$ mbar. Comprova-se que o átomo de nitrogênio está presente no filme ligado na forma ativa tetraédricamente (embora o maior número seja trigonal) produzindo variações na condutividade a temperatura ambiente em três ordens de grandeza e na energia de ativação de 0.3 eV. Assim mesmo discutiremos nas medidas de PDS (Photothermal Depletion Spectroscopy) o aumento da desordem do material com o incremento da pressão

parcial de amônia. Nas medidas de espectroscopia no visível não observamos variação apreciável no gap de Tauc e E_{04} (energia do fóton correspondente a um coeficiente de absorção do filme de 10^4 cm^{-1}) do material. Nos espectros de transmissão no infravermelho não se observou presença de modos de vibração associados a ligações com o nitrogênio, isto é, Ge-N e N-H; também foi determinado a concentração do hidrogênio ligado ao germânio, em torno de 6% obtidos através da banda de vibração Ge-H wagging.

Caracterização de camadas epitaxiais de compostos III/V usando difração de raios-X

SOUZA, C. F. DE; CARVALHO JR, W. DE
CPqD - TELEBRÁS, Campinas, SP

A fabricação de dispositivos optoeletrônicos de alto desempenho, tais como lasers de emissão monomodo, lasers sintonizáveis, etc., exige que as interfaces entre as diversas camadas de material semicondutor sejam abruptas e com baixa densidade de defeitos. Neste trabalho foram estudadas heteroestruturas de compostos III/V, crescidas por MOCVD, usando difratometria de raios-X de duplo cristal (DDC). A presença de interfaces na estrutura cristalina faz surgir oscilações periódicas ao redor do pico de difração, devido a fenômenos de interferência entre os feixes difratados. O estudo destas oscilações permite avaliar a qualidade cristalina do material e da interface, além de possibilitar a medida das espessuras das camadas. Serão apresentados resultados de DDC em estruturas de InP/InP, InP/InGaAs, e InP/InGaAs/InP. Com esta técnica foi possível identificar quebra de estequiometria nas interfaces InP/InP durante o crescimento, localizar falhas no sistema de distribuição de gases do reator e otimizar as condições de crescimento para obtenção de interfaces de boa qualidade.

MODIFICAÇÃO DO HÁBITO DE CRISTAIS DE TGS DOPADOS COM LÍTIIO

MANOEL, E. R.; HERNANDES, A. C.; ANDREETA, J. P.

Universidade de São Paulo, IFQSC, DFCM

O cristal de sulfato de triglicina (TGS) tem sido amplamente estudado devido às suas propriedades ferroelétricas, as quais o tornam de grande importância tecnológica para aplicações em detectores de radiação infravermelha. O cristal possui um plano de clivagem perpendicular a direção [010]. Estes cristais são crescidos em solução aquosa através do abaixamento lento da temperatura ou da evaporação do solvente em condições isotérmicas. Neste trabalho apresentaremos um estudo sistemático da morfologia (hábito) dos cristais de TGS:Li obtidos através da evaporação isotérmica do solvente. Este estudo permite-nos determinar as condições ótimas para o crescimento destes

cristais com uma grande área superficial da face (010), que é importante para a confecção dos detectores de infravermelho. Os resultados de indexação das faces cristalinas mostraram que existe uma forte alteração da morfologia dos cristais e que o tamanho da face (101), em relação à (001), é inversamente proporcional à concentração de lítio na solução.

OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE CRESCIMENTO DE FIBRAS MONOCRISTALINAS DE LiNbO_3 E LiTaO_3 PELA TÉCNICA LHPG

ANDREETA, M. R. B.; HERNANDES, A. C.; LIMA, C. J. DE; ANDREETA, J. P.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

A técnica de preparação de fibras monocristalinas (FCM) por fusão a laser (LHPG) é considerada uma das mais importantes técnicas de crescimento de cristais óxidos e preparação de novos materiais. FCM tem sido utilizadas, com bastante sucesso, na substituição de cristais volumétricos em diferentes aplicações, tais como: geração de segundo harmônico, registro holográfico, componentes ativos de minilasers do estado sólido, guias de onda, entre outras. Recentemente o Grupo de Crescimento de Cristais implantou essa técnica de puxamento e já produziu mais de uma centena de FCM de compostos óxidos, com diâmetro de até $250 \mu\text{m}$. No entanto, estas fibras apresentavam flutuações em diâmetro da ordem de 3%. Neste trabalho apresentamos um sistema bastante simples para o controle de diâmetro de FCM de LiNbO_3 e LiTaO_3 durante o crescimento, bem como uma discussão sobre as melhores condições de crescimento destas fibras. Com este sistema nos foi possível obter FCM de até 3 cm de comprimento com uma flutuação em diâmetro de até 0,8%. Um estudo sistemático da densidade de deslocamentos e da orientação dos domínios ferroelétricos em função do comprimento das fibras será apresentado.

CRESCIMENTO DE FLUORETOS EM ATMOSFERA REATIVA PELO MÉTODO BRIDGMAN ESTÁTICO

BUSTAMANTE, A. N. P.; SANTO, A. M. DO E.; BALDOCHI, S. L.; MORATO, S. P.

IPEN/CNEN-SP

Em presença de vapor de água um fluoreto pode perder parte de seus íons de flúor, sendo os mesmos substituídos por íons OH^- , com a liberação de moléculas de ácido fluorídrico gasoso ($\text{MF}_2 + \text{xH}_2\text{O} \leftrightarrow \text{MF}_{2-x}(\text{OH})_x + \text{xHF}$). A presença destas impurezas, mesmo em baixas concentrações pode levar a degradação das propriedades ópticas e mecânicas de cristais de fluoretos. Para evitar a ocorrência desta contaminação realiza-se, em geral, o processamento de fluoretos em presença de ácido fluorídrico ou atmosferas

reativas equivalentes obtidas pelo uso de reagentes, tais como, o difluoreto de amônia (NH_4HF_2) ou o tetrafluoreto de carbono (CF_4). Neste trabalho construiu-se um sistema Bridgman estático para crescimento de pequenas amostras (15×40 mm) de fluoretos de alta pureza. O sistema é composto por um forno resistivo, um tubo de níquel com flange de monel e uma linha de cobre para entrada e saída de gás. O mesmo pode operar em temperaturas até 900°C , em atmosfera reativa (HF , NH_4HF_2 ou CF_4). O cadinho foi confeccionado em grafite, na geometria apropriada (fundo cônico), podendo ser selado; característica especialmente útil para o crescimento de cristais dopados com materiais que apresentam alta pressão de vapor. Neste trabalho apresentaremos os detalhes da construção do sistema e os resultados preliminares de crescimento de monocristais fluoretos. Este trabalho está sendo desenvolvido com apoio FAPESP.

PURIFICAÇÃO E CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DE $\text{BaLiF}_3\text{:Ni}$

SANTO, A. M. DO E.; BALDOCHI, S. L.; FERREIRA, V.; MORATO, S. P.
IPEN/CNEN-SP
MATOS, J. DO R.
IQUSP

Pesquisas realizadas na última década demonstraram claramente o potencial de cristais isolantes dopados com íons metais de transição como cristais laser para sistemas sintonizáveis na região espectral do infravermelho. O BaLiF_3 é uma perovskita cúbica invertida e um cristal laser em potencial quando dopado com íons de metais de transição. O objetivo deste trabalho é o estudo da preparação de cristais de BaLiF_3 dopados com Ni, com qualidade óptica e cristalina para aplicações laser. Para estudo da síntese e purificação dos compostos base (BaF_2 , LiF , NiF_2 e BaLiF_3) utilizamos um hidrofluorinador e um sistema de refino por zona disponíveis no laboratório. Estes sistemas, entretanto, foram parcialmente reformados, sendo a câmara de reação de platina substituída por um tubo flangeado de níquel. A caracterização dos compostos obtidos está sendo realizada através de medidas de espectrografia de emissão, difração de raios-X e termogravimetria. Para crescimento dos cristais utilizamos a técnica de crescimento Czochralski, sendo obtidos cristais com concentrações entre 0.2 a 0.8 mol%, na direção [111]. A concentração de dopante foi determinada através de espectrografia de emissão e análise por ativação. Curvas de intensidade de difração de nêutrons, obtidas pelo método do cristal girante, mostraram que os cristais dopados com níquel apresentam ótima qualidade cristalina. Apoio FAPESP.

POÇOS QUÂNTICOS DE $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ COM DOPAGEM PLANAR DE Si NO CENTRO

CESCHIN, A. M.; QUIVY, A. A.; SOARES, J. A. N. DE T.; LIMA, A. P.; LEITE, J. R.
LNMS - Depto. Fis. Mat. e Mec. - Instituto de Física da USP - São Paulo, SP

Apresentamos pela primeira vez um estudo de fotoluminescência (PL) e fotoreletância (PR) de poços quânticos de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ com dopagem planar (delta doping) de Si no centro. As amostras foram crescidas sobre substratos de GaAs (100) semi-isolantes e consistem de uma camada tampão (buffer) de GaAs de 700 nm (crescida à velocidade de $1\mu\text{m}/\text{h}$), uma barreira de GaAs de 50 nm, um poço quântico de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ com dopagem planar de Si no centro e uma barreira de 50nm de GaAs. Toda a estrutura foi crescida a baixa velocidade ($0.30\mu\text{m}/\text{h}$ para o GaAs e $0.36\mu\text{m}/\text{h}$ para o InGaAs). A largura dos poços e a concentração de Si no centro do poço variaram de 60 Å a 200 Å e de zero (poço quântico simples) até 10^{13} cm^{-2} (poço muito dopado) respectivamente. Todas as amostras foram investigadas pelas técnicas de (PL) e (PR). O espectro obtido por PL a 77 K mostra um alargamento da linha de emissão para os poços com dopagem planar de Si em comparação ao poço não dopado: quanto maior a concentração mais larga é a linha de emissão. Também observou-se um deslocamento da linha de emissão para as energias mais altas quando a concentração de Si aumenta. No espectro de PR foi observado claramente os sinais advindos da região de dopagem planar, abaixo do gap do GaAs e não observou-se as estruturas normalmente encontradas em espectros de amostras com poços de InGaAs sem dopagem planar.

ALANINE: GROWTH AND PROPERTIES

VARELA, A. T.; NUNES, F. D.; R. JÚNIOR, J. J.; MENDES FILHO, J.; MELO, F. E. DE A.; MOREIRA, J. E. DE C.
UFC

The manipulation of light by electrical or all-optical means, the shifting of light wavelength are examples of nonlinear effects with promising applications in telecommunication and other fields. These applications have demanded search for new optical materials with large optical nonlinearities. Organic materials have long been candidates for use in nonlinear optical devices. The large variety of organic materials has permitted a long list of attractive materials; however up to now no one can be considered as ideal to this or that application. Among the organics the single crystals have presented potentialities as second harmonic generators, downconversion, electrooptic switching. On the other hand the existence of problems with their structural organization, presence of defects, handling and others require

more efforts to improve crystals quality. In this work are present techniques used to grow several aminoacids monocrystals. In particular we present results for growing, polishing and handling alanine. Optical, thermal and structural properties of this material were measured and the results are presented.

Estudos de Interfaces usando difração de raios-X em estruturas multicamadas crescidas por MOCVD

CARVALHO JR, W. DE; SOUZA, C. F. DE
Centro de Pesquisa e Desenvolvimento -
CPqD/TELEBRAS

Com o aparecimento de técnicas de crescimento epitaxial que permitem o crescimento de camadas cristalinas com espessuras de algumas dezenas de Angstroms, tornou-se necessário o desenvolvimento de técnicas de difração de raios-X para estudo destas estruturas e interfaces. Nesta trabalho mostraremos estudos de interfaces em estruturas multicamadas crescidas por MOCVD e formadas por 10 períodos de InP/InGaAs, com espessuras nominais de 200 e 100Å respectivamente. As caracterizações das interfaces foram feitas usando difratometria de raios-X de duplo cristal. Os difratogramas foram simulados, usando um modelo cinemático de difração de raios-X e comparados com os resultados experimentais. Através das simulações foi possível identificar camadas intermediárias nas interfaces InP/InGaAs e InGaAs/InP. Serão propostos modelos para explicar a formação das interfaces.

CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DE ANTIMONETO DE GÁLIO PELO MÉTODO CZOCHRALSKI

OLIVEIRA, C. E. M. DE; CARVALHO, M. M. G. DE
UNICAMP - IFGW - DFA-LPD

A system to grow monocrystals was recovered and connected to a 8-bit MSX microcomputer. Gallium Antimonide (GaSb) bulk samples of 1 inch diameter, 200g, $\{100\}$ oriented, undoped and Te-doped (N type) were grown. The wafers were characterized with EPD (Etch Pit Density), Hall and Photoluminescence measurements. The undoped wafers were typically P type, with carrier concentration of $1.2 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, mobility of $642 \text{cm}^2 \text{V.s}$, at room temperature, and EPD less than 100cm^{-2} . The Te-doped wafers have carrier concentration from 2.0×10^{17} to $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ with EPD less than 1000cm^{-2} . Samples with carrier concentration more than $1.0 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ are polycrystalline. In this work details both on the growth system and growth technique will be presented.

*Propriedades e Caracterização III
(CCP, OTI, MAT) - 10/06/94*

ACTIVE AND PASSIVE FLUORIDE GLASS FIBERS

POULAIN, M.

Lab. des Matériaux Photoniques, Université de Rennes I, F-35042 RENNES - FRANCE

Heavy metal fluoride glasses have been discovered and studied in numerous multicomponent systems based on fluoride glass progenitors such as ZrF_4 , HfF_4 , AlF_3 , InF_3 , GaF_3 and CdF_2 . Fluorozirconate glasses have been more extensively investigated, especially because standard compositions exhibit good resistance to devitification while their general physical properties are convenient for use in standard conditions. Fluoride glasses are transparent in the infrared spectrum at much larger wavelength than silicate glasses and they are potentially more transparent than silica at any wavelength. Bulk optical components - windows, prisms and lenses - have been manufactured but practical applications are centered upon optical fibers. Multimode fluorides glass fibers are used for contactless thermal measurements, for remote chemical analysis and for infrared instrumentation. Power delivery has been successfully implemented with various IR lasers such YAG:Ho, YAG:Er, HF and DF, leading to applications in laser surgery. Single mode fluorozirconate glass fibers have developed for their potential ultralow optical losses which would make possible repeaterless links over more than 1000 Km. This goal still requires additional developments. Single mode fibers have been used for interferometric astronomy by coupling two optical telescopes. Numerous fiber lasers have been constructed with rare earth doped fluoride glass fibers. Advantages of fluoride glasses are: i) easy control of rare earth concentration, ii) high transparency both at pump and emission wavelength, iii) low phonon energy. Among other possibilities, blue lasers have been achieved using IR pumping and upconversion processes. Much interest concentrates on optical amplification for telecommunications. Efficient Erbium Doped Fiber Amplifiers (EDFA) have been obtained with silica fibers. Single mode fluoride glass fibers make the basis for optical amplifiers at 0.8 and $1.3 \mu\text{m}$ with Tm^{3+} and Pr^{3+} ions respectively. Amplification at $1.3 \mu\text{m}$ is a key issue for the future optical networks. The poor quantum efficiency (\sim approx 3 %) of the present ZBLAN fibers implies that pump power at $1.016 \mu\text{m}$ is large, which limits the achievement of reliable amplifiers. Halide glasses with lower phonon energy should exhibit higher efficiency. Fluoroindate and mixed cadmium halide

glasses are promising candidates. They are now under development with the support of the European research programmes RACE and Eurêka. Their optimization should allow laser power delivery for CO lasers operating around 5 μm .

Influência da Concentração de Nióbio em Vidros Fosfatos

ARANHA, N.

IFGW - Unicamp

ALVES, O. L.

IQ - Unicamp

BARBOSA, L. C.

IFGW - Unicamp

Os vidros tem demonstrado grande interesse no campo das comunicações ópticas e da ótica integrada, devido, entre outros fatores, a sua facilidade de conformação e compatibilidade com as fibras ópticas. Entre os diversos sistemas existentes, destacamos os vidros fosfatos, que até pouco tempo tinham uma aplicação limitada devido a sua fragilidade química, sendo facilmente atacados por soluções aquosas ou pela própria umidade atmosférica. Uma melhora considerável desses vidros foi obtida através da introdução de óxidos, tais como, o Nb_2O_5 , que reforça a estrutura vítrea, aumentando com isso seu campo de atuação. Este fato, aliado a possibilidade de incorporação de terras raras, como por exemplo o Er_2O_3 , e a confecção de guias de onda, colocam os vidros fosfatos numa posição competitiva com os demais sistemas. Neste trabalho apresentaremos alguns resultados que mostram a influência do nióbio nas propriedades do sistema: P_2O_5 - PbO - Nb_2O_5 - K_2O . Mostraremos também os resultados referentes a incorporação de érbio na matriz vítrea e a produção de guias de onda por troca iônica. TELEBRAS/FINEP/CNPq/FAPESP.

Mecanismos de desexcitação radiativa e não radiativa de íons Ni^{2+} em cristais de $BaLiF_3$

DUARTE, M.; MARTINS, E.; VIEIRA, M. M. F.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; BALDOCHI, S. L.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN-SP
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos

As propriedades ópticas de íons de níquel, principalmente em sítios de simetria octaédrica, vem sendo estudadas desde a pesquisa básica até aplicações como um elemento luminescente eficiente. Nesse trabalho nós relatamos a dependência do tempo de vida luminescente dos íons Ni^{2+} com a temperatura e a concentração de um novo cristal, o $BaLiF_3$. Esse cristal apresenta estrutura fluorperovskita cúbica invertida e vem sendo investigado como um potencial meio laser ativo na região de 1.5 μm . O conhecimento dos mecanismos de desexcitação é fundamental para caracterização espectroscópica de meios laser ativos. As medidas foram feitas em amostras com diferentes concentrações de

Ni^{2+} (0,2 a 0,8 mol%) num intervalo de temperatura de 350 a 4 K. Foi observado uma diminuição do tempo de decaimento com o aumento da concentração devido a um aumento da componente de desexcitação não radiativa. Uma dependência semelhante foi observada em função da temperatura.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS EM VIDROS DO SISTEMA

$TeO_2 - Li_2O - TiO_2$

CUEVAS, R. F.; BARBOSA, L. C.; SOLANO, V. C.; ARANHA, N.; ALVES, O. L.

Unicamp

Neste trabalho foram estudados o espectro de absorção óptica e o espectro infravermelho dos vidros da família $(95 - x)TeO_2 - xLi_2O - 5Ti_2O_3$, onde $x = 5, 10, 15, 20, 25$. Calculou-se os índices de refração seguindo o modelo de Sellmeier e a dispersão destes quando se relacionam com o comprimento de onda. O coeficiente de absorção α foi estimado da equação: $\alpha = (1/d)\ln(1/T)$ onde d é a espessura da amostra e T é a transmitância. Do gráfico de Urbach ($\ln\alpha$ vs $\hbar(\omega)$) foram calculados os valores da cauda de Urbach ΔE que variam entre 0.30 e 0.34 eV. O gap de energia óptico E_{opt} para cada vidro foi obtido pela extrapolação da região linear do gráfico de Tauc $(\alpha \hbar(\omega))^{1/2}$ vs $(\hbar(\omega))$ em $(\alpha \hbar(\omega))^{1/2} = 0$, encontrando-se que este parâmetro variou entre 3.34 e 3.70 eV dependendo da composição. O cut-off UV-Vis passa por um mínimo quando se relaciona com o comprimento de onda, indicativo de uma possível mudança estrutural. Em geral o deslocamento da banda de absorção a comprimentos de onda menores pode estar relacionado com o rompimento da ligação Te-O, possibilitando o acomodamento estrutural e a concentração relativa de diferentes unidades fundamentais. Por outro lado, outros autores sugerem que o deslocamento da banda de absorção a comprimentos de onda maiores deve-se as transições eletrônicas nos oxigênios não ligados. A principal banda de absorção infravermelho, encontra-se entre 724-716 cm^{-1} a qual é atribuída as vibrações Te-O. O espectro infravermelho mostra que a incorporação do óxido modificador produz unidades TeO_3 , as quais sofrem deformações na composição com 15 mol % de Li_2O . TELEBRAS/FINEP/CNPq

TRANSIÇÃO DE FASE EM MONOCRISTAIS DE L-TREONINA.

SERRA, K. C.; MELO, F. E. DE A.; MENDES FILHO, J.; NUNES, F. D.; MOREIRA, J. E. DE C.

UFC

A L-Treonina é um aminoácido encontrado no corpo humano. O espectro de absorção infra-vermelho e os espectros Raman da Treonina foram estudados na temperatura ambiente com o objetivo de identificarmos os modos normais de vibração observados por estas técnicas. Estudamos também a evolução das frequências e larguras de linha dos modos normais de vibração no intervalo de temperatura entre 15K e 470K. Destas experiências, observamos mudanças qualitativas nos espectros Raman, que são entendidas como uma transição de fase sofrida pelo cristal entre 370K e 470K. Esta transição foi classificada como uma transição de segunda ordem do tipo conformacional, onde alguns íons da molécula mudam seus sítios locais de simetria. Estudamos também efeitos piroelétricos neste material no intervalo de 300K a 470K. Estas medidas mostraram um comportamento anômalo no mesmo intervalo de temperatura estudado por espalhamento Raman, confirmando a existência de uma transição de fase de segunda ordem do tipo conformacional.

ESTUDO DA DEPOSIÇÃO DE ENERGIA POR FEIXE DE ELÉTRONS EM FILMES FINOS.

JACOBSON, L. G.; SAMPAIO, E. S. DE; NUNES, R. A.; CARMO, L. C. S. DO

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
GRELLA, L.

Instituto di Elettronica dello Stato Solido - Itália
FREIRE, R. R.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Este trabalho tem como objetivo caracterizar a distribuição espacial da densidade de energia depositada por um feixe de elétrons de 10 a 40 keV de energia em filmes finos de halogenetos alcalinos. Os halogenetos alcalinos foram escolhidos pela sua transparência na região visível do espectro e que quando irradiados apresentam bandas de absorção características dos diversos centros de cor assim criados. A partir da intensidade de absorção destas bandas obtém-se a densidade de defeitos presentes. Para se estudar a distribuição da energia depositada foi feito um programa de computador, utilizando-se do método de Monte Carlo, para simular a interação dos elétrons com os materiais de interesse. Valores médios do número de massa e atômico foram utilizados na equação de Bethe para o cálculo da perda de energia. São apresentados os resultados da deposição de energia obtidos com filmes de espessura total de 4 μm de LiF, KBr e NaF, para cada micron de profundidade e para diversas energias do feixe de elétrons,

mantendo-se fixo o número de elétrons incidentes; assim como a evolução da dose para cada fatia de 1 μm de espessura desses filmes. Propõe-se, finalmente, a realização de medidas de absorção óptica de filmes irradiados de KBr com uma fatia de LiF de 1 μm de espessura em diversas profundidades, correspondendo ao primeiro, segundo, terceiro ou ao quarto micron do filme, de tal forma a podermos comparar diretamente as medidas ópticas com as simulações, uma vez que as bandas de absorção óptica dos centros de cor formados são facilmente distinguíveis para o KBr e o LiF.

Propriedades e Caracterização IV (CCP) - 10/06/94

BISTABLE NONLINEAR SWITCHING IN SEMICONDUCTOR (CdTeS) DOPED GLASS

SOMBRA, A. S. B.; PAIVA, J. A. C. DE
Laboratório de Ótica Não Linear e Lasers - UFC

Semiconductor doped glass have attracted considerable attention during the past few years (1,2,3). These glasses are attractive for fabrication of nonlinear and all-optical guided wave. In recent years a great effort has been made in understanding the electrical properties of these glasses. The characteristic of the electrical switching is the strong deviation from Ohm's law for an applied voltage. When the field across the sample reach a certain value, the conductivity increases by several orders of magnitude and the material passes from a resistive to a conducting state (4). In the present work we have studied the switching behaviour of CdTeS doped glass around room temperature with a view to establishing the mechanism of the observed reversible bistable threshold switching. In summary electrical threshold switching was observed in CdTeS doped glass. The effect was explained taking into account the Joule effect that leads to a strong increase of the sample conductivity. We assume that the sample temperature is proportional to the injected electrical power in the sample. This model gives a good explanation of the nonlinear reversible behaviour observed in the I-V curves measured in this material.

REFERENCES

- 1 - A.S.B.Sombra, Opt. and Quantum Electronics, 22, 335 (1990)
- 2 - A.S.B.Sombra, Solid State Comm., 82, 805 (1992)
- 3 - A.S.B.Sombra, Solid State Comm., 88, 305 (1993)
- 4 - R.Montani, M.Levy, J.L.Souquet, J.Non Cryst Sol, 149, 249 (1992)

PHASE TRANSITION IN KDP, INDUCED BY ON APPLIED STATIC ELECTRIC FIELD.

MOREIRA, S. G. C.; MELO, F. E. DE A.; MENDES FILHO, J.; NUNES, F. D.; MOREIRA, J. E. DE C.
UFC

Potassium Dihydrogen Phosphate (KDP) is the prototype of a family of crystals with bridging hydrogen bonds. Its physical properties have been studied extensively in the last five decades (Mason, 1946; Scott, 1974). It was first shown by Busch (1938) that KDP exhibits a ferroelectric phase transition at low temperature. It is now known that KDP can be in at least four crystalline modifications, in a temperature range going from 10K to 525K (fusion point). The two most well studied phases, the tetragonal and the orthorhombic phases, belong to I42d (D2d12) and Fdd2 (C2v19) space groups, respectively. At low temperature, KDP undergoes a phase transition induced by an applied static electric field. This phase transition was studied by light scattering. It was found that on increase in the symmetry of the crystal with the applied field, going from a monoclinic to an orthorhombic structure already reported, induced by uniaxial stress. The reversibility of the transition is discussed. The tetragonal phase is found at 20K under reverse static electric field.

Busch, G. (1938) *Helv. Phys. Acta* 11, 269
Mason, W. P. (1946) *Phys. Rev.* 69, 173
Scott, J. F. (1974) *Rev. Mod. Phys.* 46, 83

ESTUDO DE CRISTAIS DO TIPO $Li_{(1-x)}H_xIO_3$ POR ESPALHAMENTO RAMAN.

OLIVEIRA, M. A. S.; PIMENTA, M. A.; BOURSON, P.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

O cristal $LiIO_3$ tem sido intensamente estudado nos últimos anos devido a propriedades de óptica não linear e efeitos piezelétricos nele existentes. Também apresenta uma especial atração relacionada às transições de fase estruturais. O cristal misto $Li_{(1-x)}H_xIO_3$, tem um particular interesse, uma vez que o próton é parte da rede, gerando uma alta condutividade iônica, bem como propriedades ferroelétricas e um grande número de transições de fase. A síntese do cristal se dá através da seguinte reação: $(1-x)Li_2CO_3 + 2HIO_3 \rightarrow 2Li_{(1-x)}H_xIO_3 + (1-x)CO_2 + (1-x)H_2O$ onde os diferentes valores de x nos dá a concentração desejada do íon H^+ no cristal. Medidas de espalhamento de luz usando a técnica micro-Raman foram realizadas para alguns valores de concentração x . A análise e discussão dos resultados serão apresentados.

REATIVIDADE E EVOLUÇÃO ESTRUTURAL DO PLZT X/65/35 COM A TEMPERATURA DE CALCINAÇÃO

GARCIA, D.

Depto de Física e Ciências dos Materiais, IFQSC - USP
PIZANI, P. S.; EIRAS, J. A.
Universidade Federal de São Carlos

Cerâmicas ferroelétricas transparentes (CFT), dentro da área de física do estado sólido, têm despertado interesse quanto ao estudo do efeito eletro-ótico e de transição de fase difusa. Entre as diferentes composições destacam-se as do sistema $(Pb_{1-x}La_x)(Zr_{1-y}Ti_y)O_3$, ou PLZT, devido à alta transparência e aos altos coeficientes eletro-óticos, principalmente na região $y = 0.35$ e $0.08 \leq x \leq 0.10$. Sabe-se que o PLZT, preparado por métodos convencionais, apresenta homogeneidade estrutural somente após uma queima acima de 1100°C. Entretanto, pouco se tem discutido sobre sua evolução estrutural durante o processo de preparação. Neste trabalho apresentamos um estudo da reatividade e da evolução de fases e parâmetros de rede do PLZT, com $y = 0.35$ e $x = 0.08, 0.09$ e 0.10 em função da temperatura de calcinação. As amostras foram preparadas a partir do método convencional de mistura de óxidos e de um novo método de precipitação química desenvolvido no Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas (DF -UFSCAR). A determinação das fases presentes é realizada através de difração de raios-X e espectroscopia Raman. Os resultados demonstram forte influência do método de preparação na evolução estrutural e reatividade do material. Amostras preparadas pelo método químico apresentam homogeneidade composicional após queima a temperaturas inferiores a 1000°C.

DEFORMAÇÃO ELÁSTICA E FORMAÇÃO DE DOMÍNIOS NA TRANSIÇÃO FERROELÁSTICA DO $LiKSO_4$: UM ESTUDO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

MOREIRA, R. L.; RIGHI, A.; LEITÃO, U. A.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

DÉSERT, A.; GIBAUD, A.

Faculté des Sciences, Université du Maine, França

O Sulfato de Lítio e Potássio é um cristal que tem despertado bastante interesse por apresentar uma grande variedade de fases estruturais, entre as quais, fases piezoelétricas, ferroelásticas e, possivelmente, fases incommensuráveis. Apesar do grande número de trabalhos experimentais realizados com diferentes técnicas acerca deste material, existe ainda uma grande controvérsia na literatura sobre a estrutura destas fases e, mesmo, sobre a existência de algumas delas. Para contribuirmos ao debate sobre as simetrias das fases de baixa temperatura, nós utilizamos difratômetro

de raios-X (técnica do duplo-cristal) para medirmos a evolução térmica dos parâmetros de rede, o aparecimento da deformação elástica espontânea e de domínios ferroelásticos. Os resultados obtidos confirmam as simetrias trigonal (205K) e monoclinica (180K), para as fases imediatamente abaixo da temperatura ambiente, nesta ordem no resfriamento.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

ESPECTROSCOPIA MOSSBAUER E CORRENTES DE DESPOLARIZACAO TERMO-ESTIMULADAS EM VIDROS NIOBOFOSFATOS DOPADOS COM FERRO

ARAUJO, E. B. DE; PAIVA, J. A. C. DE; ARAUJO, M. A. B. DE; SOMBRA, A. S. B.

Departamento de Física-Universidade Federal do Ceara
ROSAS, F.

Departamento de Engenharia Mecânica-Universidade de Fortaleza

Correntes de despolarização termo-estimuladas (TSDC) e espectroscopia Mossbauer são usados para estudar os mecanismos de condução e polarização elétrica em vidros niobofosfatos com composição dada por $\{(xNb_2O_5); (0.5-x)P_2O_5); 0.5Li_2O) + yFe_2O_3\}$ com x variando entre 0 e 50mol% e $y = 5\%$ de peso total. Os resultados Mossbauer foram obtidos na temperatura ambiente (300K) e os de TSDC em temperaturas variando de 77K até 450K. Os parâmetros Mossbauer indicam claramente a presença de Fe(+2) e Fe(+3) com a razão Fe(+2)/Fe(+3) variando com as concentrações de Nb e P são observadas através da espectroscopia Mossbauer. As medidas de TSDC mostram a existência de dois picos os quais podem ser atribuídos a processos de relaxação dipolar e efeitos de Maxwell-Wagner. Também são usadas medidas de condutividade DC com a finalidade de correlacionar a resistividade do material com a razão Fe(+2)/Fe(+3).

Propriedades Óticas, Dielétricas e Ferroelétricas (CCP) - 10/06/94

Estudo da Desordem em Ligas de Carbetto de Silício Amorfo Hidrogenado Obtidas Por "Glow Discharge"

ROVIRA, P.; SCHMIDT, C.; BITTENCOURT, C.; ALVAREZ, F.

Laboratório de Conversão Fotovoltaica - UNICAMP
TESSLER, L.

LPMC - Ecole Polytechnique

Atualmente existe um grande interesse no estudo das ligas de carbetto de silício amorfo hidrogenado (a-

$Si_xC_{1-x}:H$) devido à sua aplicação em dispositivos optoeletrônicos, tais como painéis fotovoltaicos. A mudança da concentração relativa entre o Si e o C permite variar o gap do material entre 1.9 e 3.6 eV (para $x=0$ e $x=0.43$, respectivamente). Porém a inclusão de carbono aumenta a desordem. Estamos analisando a evolução da desordem com a adição de carbono em ligas de a- $Si_xC_{1-x}:H$ depositadas pelo método de "Glow Discharge". Esse estudo é feito mediante as medidas da largura da cauda de valência e da densidade de estados de defeitos por "Photothermal Deflection Spectroscopy" (PDS) em comparação com medidas de luminescência, onde analisamos a evolução da largura e da posição deste sinal em função da temperatura.

ESTUDO ÓPTICO CRISTALINO DO $LiKSO_4$ SOB PRESSÃO UNIAXIAL

LEITÃO, U. A.; RIGHI, A.; PIMENTA, M. A. C.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

BOURSON, P.

MOPS, Université de Metz - SUPELEC, França

O Sulfato de Lítio e Potássio tem sido bastante estudado nos últimos anos devido à sua rica sequência de fases. No entanto, existem muitas questões abertas relacionadas basicamente com algumas transições e a simetria de algumas fases. No presente trabalho, nós apresentamos um estudo óptico cristalino do $LiKSO_4$ sob pressão uniaxial, no intervalo de temperaturas de 100-300K. Medidas da dependência térmica da birrefringência Δn_{ab} e Δn_{bc} nas fases de baixa temperatura foram realizadas. Essas medidas foram possíveis devido a indução de um monodomínio ferroelástico pela aplicação de pressão uniaxial ao longo do eixo b. Além disso, um estudo sistemático da dependência da birrefringência Δn_{ab} em função da pressão uniaxial aplicada foi obtido, o qual permitiu a determinação dos coeficientes piezo-ópticos do $LiKSO_4$. Nossas conclusões nos permitiram esclarecer as discrepâncias apresentadas na literatura com relação às simetrias das fases de baixa temperatura.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

AGREGADOS DE PRATA EM DISPERSÕES COLOIDAIS. UM ESTUDO POR ESPALHAMENTO DE LUZ.

VIDAL, A.; LICÍNIO, P.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

Neste trabalho, estudamos um sistema de agregados de prata em dispersão coloidal. Desenvolvemos um processo para a obtenção dos agregados a partir de uma reação química de oxidação-redução. No estudo dos agregados, utilizamos fundamentalmente técnicas de espalhamento de luz. Através de medidas de espalhamento

estático de luz, observamos que os agregados de prata são fractais e que sua dimensão está em torno de 1,4. Esta dimensão indica que o mecanismo de crescimento envolve o movimento difusivo das partículas agregantes e também interações atrativas dipolares entre elas. Observamos também que a própria dispersão coloidal apresenta uma estrutura fractal. A existência destas interações é evidenciada por diferentes medidas de espalhamento estático de luz.

Índices de Refração Não Linear em Vidros: Comparações Entre Modelos Teóricos.

BARBOSA, L. C.; CUEVAS, R. F.; SOLANO, V. C.;
ARANHA, N.; CESAR, C. L.; ALVES, O. L.

Unicamp

Neste trabalho, realizamos comparações entre as avaliações teóricas de tres modelos que tentam expressar a propriedade não linear de terceira ordem em vidros. Estudamos em particular o sistema vítreo $Li_2O - TiO_2O - TeO_2$, que segundo a literatura apresenta valores da susceptibilidade de terceira ordem em torno de $10^{-14} cm^2/W$, valores estes extremamente elevados para vidros. Por outro lado, o sistema vítreo $TeO_2 - TiO_2 - PbO$, apresenta um dos maiores valores de $\chi^{(3)}$ observados no campo dos materiais vítreos, ou seja, $10^{-13} cm^2/W$. Diversos modelos teóricos tratam deste tema, por exemplo, Lines faz uso do conceito de orbital de ligação e apresenta uma relação com alguns parâmetros materiais como gap de Sellmeier, distância de ligação cátion-ânion e índice de refração do vidro. Boling apresenta outra teoria, fazendo uso do conceito de fator de campo de Lorentz, utilizando em sua expressão matemática o índice de refração e o número de Abbe. Finalmente, Shak-Bahae apresenta outro modelo teórico que é válido para semicondutores e que relaciona esta propriedade com o gap do material. O objetivo deste trabalho é avaliar os valores das propriedades ópticas não lineares dos vidros mencionados acima, os quais foram preparados em nosso laboratório, onde estimamos todos os parâmetros das teorias mencionadas e comparamos os resultados com os dados da literatura, os quais foram medidos por métodos ópticos como por exemplo, mistura de quatro ondas. TELEBRAS/FINEP/CNPq/FAPESP.

ELETRO DIFUSÃO, ABSORÇÃO ÓPTICA E TERMOLUMINESCÊNCIA NO QUARTZO E BERILO

YUKIMITU, K.

Unesp-Ilha Solteira

WATANABE, S.

IFUSP

No presente trabalho, foi montado um sistema de eletrodifusão para o estudo dos efeitos da substituição de íons alcalinos, presentes no canal estrutural, por íons

de hidrogênio, nas propriedades termoluminescentes e ópticas do quartzo.

A corrente elétrica de eletrólise apresenta, na parte inicial de aquecimento, um ombro ou pico de corrente. Através da análise do comportamento deste pico e informações obtidas de dados de absorção óptica na região espectral do infra-vermelho, concluiu-se que o pico presente na curva inicial de eletrólise se deve ao complexo $[A^{3+}/M^+]$.

As medidas de termoluminescência e absorção óptica na região espectral do visível e ultra-violeta foram feitas em amostras de quartzo eletrodifundidos e não eletrodifundidos e chegou-se à proposição de uma reação envolvendo os alcalinos presentes no canal. Nesta reação, os íons alcalinos fazem o papel de centros armadilhadores de íons de oxigênio, produzidos pela radiação ionizante, e estabilizadores de vacâncias de oxigênio. O aquecimento, em torno de $300^\circ C$, provoca a desestabilização desses centros armadilhadores, liberando os íons alcalinos que reagem com os defeitos $[AlO_4]^o$ emitindo luz TL.

Aproveitando a existência de canais estruturais, semelhantes ao quartzo, tentou-se eletrodifundir H^+ no berilo. Através de medidas de termoluminescência e corrente inicial de eletrólise, discute-se a possibilidade da existência do defeito $[Fe^{3+}/M^+]$ no berilo.

Apoio Financeiro: CAPES e FINEP.

PROPRIEDADES PIROELÉTRICAS E DIELÉTRICAS DO PLZT 9/65/35 DOPADO COM MnO_2 .

MOREIRA, E. N.; EIRAS, J. A.

Universidade Federal de São Carlos

Titanato-zirconato de chumbo modificado com lantânio (PLZT) com razão $Zr/Ti=65/35$ com a quantidade de lantânio entre 7 a 10% são relaxores ferroelétricos. A Transição de fase difusa (TFD) no PLZT é explicada por flutuação de composição (modelo de Isupov), ou pelo modelo proposto por Yokosura que assume a existência de fases intermediárias, compostas por micro domínios polares embebidos em uma matriz não polar. A relaxação dielétrica tem sido modelada também pela relação de Vogel-Fulcher, e um modelo de vidro de spins foi proposto por Viehland. Entretanto, a influência de dopantes na (TFD) ou no comportamento relaxor do PLZT não têm sido investigada. A influência da adição de MnO_2 (1 a 3% molar) nas propriedades dielétricas e pirolétricas do relaxor titanato-zirconato de chumbo modificado com lantânio, PLZT 9/65/35 foi estudada utilizando técnicas de espectroscopia de impedância e medida de corrente pirolétrica. A dependência da permissividade com a frequência e o comportamento da polarização em função da temperatura foram comparados aos obtidos para o PLZT 9/65/35 "puro". Os resultados mostram que a presença

do Mn na rede do PLZT inibe a relaxação da permissividade dielétrica relativa e aumenta a temperatura em que ocorre a despolarização.

INFLUÊNCIA DAS CONDIÇÕES DE POLARIZAÇÃO NO ENVELHECIMENTO DE CERÂMICAS FERROELÉTRICAS

MEDEIROS, J. P. DE; EIRAS, J. A.

UFSCar

Cerâmicas ferroelétricas, quando submetidas à aplicação de campo elétrico, podem apresentar com o tempo variações com o tempo de suas propriedades ferroelétricas e eletromecânicas. Esse fenômeno é denominado envelhecimento. Os mecanismos que descrevem o envelhecimento em ferroelétricos cerâmicos baseiam-se em análises dos tipos de domínios, da mobilidade das paredes de domínios, das características dos contornos de grão e de defeitos da rede. A contribuição de cada um desses mecanismos não está até o momento muito bem estabelecida. Neste trabalho serão apresentados resultados preliminares da influência das condições de polarização (aplicação de campo elétrico dc) no envelhecimento da constante dielétrica, fator de dissipação e coeficiente de acoplamento eletromecânico de amostras de PZT dopadas com Fe, Nb e La. As amostras foram polarizadas à temperatura ambiente, à 80 C e à 120 C, e resfriadas ou não sob a ação do campo elétrico.

CARACTERIZAÇÃO DIELÉTRICA, ELÁSTICA E PIEZOELÉTRICA DE COMPÓSITOS PIEZOELÉTRICOS (1-3) POLÍMERO-CERÂMICA.

BÁSSORA, L. A.

UFSCAR

EIRAS, J.

Universidade Federal de São Carlos

Transdutores piezoelétricos polímero-cerâmica com conectividade 1-3, foram preparados com concentrações (volume fracionário) de cerâmicas piezoelétricas entre 7% e 42%. As propriedades dielétricas, elásticas e piezoelétricas para estes compósitos foram medidas e comparadas com valores obtidos por modelamento teórico. Estas propriedades para os transdutores compósitos (1-3) podem ser controladas de modo a se adequarem ao material investigado. Alto fator de acoplamento eletromecânico ($K = 0.60$), baixa impedância acústica ($Z = 7 \text{ Mrayl}$), constante dielétrica alta (200) e baixas perdas mecânicas ($Q = 16$) e elétrica (0.003), foram obtidas para compósitos com uma concentração de cerâmica próxima a 15%. Modos Laterais de vibrações, que surgem devido a periodicidade dos palitos no compósito (reflexões de Bragg), provocam altas perdas (baixo fator de Qualidade Mecânico) na região de 37% em volume fracionário de PZT, causando problemas em certas aplicações como em diagnose médica.

Espalhamento Raman e Constante Dielétrica de monocristais de L-Asparagina

MORENO, A. J. DE D.

UFMA

MENDES FILHO, J.; MELO, F. E. A.; MOREIRA, J. E. DE C.; NUNES, F. D.

UFC

Monocristais de asparagina monohidratada foram crescida a partir de evaporação controlada a uma temperatura de 5C de soluções supersaturadas na proporção de 2,1g do sal para 100ml de água. Estes monocristais cristalizam em uma estrutura ortorrômbica pertencentes ao grupo espacial D_2^4 com quatro moléculas por célula unitária, ocupando sítios C_1 com quatro moléculas. Estudamos as frequências dos modos normais de vibração em função da temperatura no intervalo de temperatura de 20K a 300K. Classificamos os modos ativos no Raman segundo as representações irredutíveis do grupo D_2 , através de espalhamento Raman polarizado. 249 dos 252 modos normais de vibração são ativos no Raman; a representação A contém 63 modos enquanto que as representações B_1 , B_2 e B_3 , que são ativas no Raman e no infravermelho, possuem cada uma 61 modos. Fomos capazes de classificar as frequências dos modos normais de vibração em cada representação irredutível do grupo fator D_2 segundo a natureza das ligações químicas, e estudamos a variação das frequências em função da temperatura. Estudamos o comportamento da constante dielétrica em função da temperatura no intervalo de 70K a 300K. Destes estudos concluímos que a asparagina monohidratada não exibe nenhuma transição de fase no intervalo de 20K a 300K, comportando-se de forma diferente da taurina, que exibe uma transição de fase de segunda ordem. Ressalta-se que existem pontes de hidrogênio presentes em ambos os monocristais.

RESONÂNCIAS PIEZOELÉTRICAS EM FERROELÉTRICOS

MELO, F. E. DE A.; MOREIRA, S. G. C.; MENDES FILHO, J.; NUNES, F. D.; MOREIRA, J. E. DE C.

UFC

O estudo da instabilidade estrutural no KDP, próximo à transição de fase ferroelétrica, foi feito por meio de ressonâncias piezoelétricas, usando uma técnica simples descoberta por nós. Voltagens de saída do sistema tão intensas quanto a voltagem de entrada, são observadas para algumas frequências ressonantes, quando a voltagem e aplicada é na direção [001] com em z. Não observamos ressonâncias piezoelétricas para cristais com corte x ou y. Em geral, o caracter das ressonâncias piezoelétricas ou mesmo para todas as placas com corte z, mesmo que tenham tamanhos diferentes. Um campo

elétrico aplicado na direção [001] produz deformações piezoelétricas perpendiculares ao eixo-c cristalino. Estudamos as transições de fases ferroelétricas do KDP e Sal Rochelle em função da temperatura e pressão uniaxial. Os resultados mostraram que estes materiais exibem dinâmicas diferentes. Estes comportamentos são explicados com base nos modelos de modos normais de vibração amolecidos (soft modes), que são parâmetros de ordens das transições ferroelétricas que estes materiais exibem.

REVERSIBILITY OF A PHASE TRANSITION IN KDP UNDER UNIAXIAL STRESS

MOREIRA, S. G. C.; MELO, F. E. DE A.; MENDES FILHO, J.; MOREIRA, J. E. DE C.; NUNES, F. D.
UFC

Crystals of KDP undergo a number of temperature dependent phase transitions. These structural phase transitions present anomalies in some properties that can be observed by several experimental techniques. Due to its interesting electrooptic properties and some allusive aspects of the paraelectric-ferroelectric phase transition, KDP has been the object of many experimental and theoretical researchers [1-5]. Early X-rays results [3] have shown that in the ferroelectric phase K^{1+} , P^{5+} and O^{2-} ions are displaced along c-axis from their original positions in the paraelectric phase. Raman spectra

- 1 - G. Bush, *Helv. Phys. Acta*, 11, 269 (1938)
- 2 - W. P. Mason, *Phys. Rev. B*, 69, 173 (1946)
- 3 - B. C. Frazer and R. Pepinski, *Acta Cryst.*, 6, 273 (1953)
- 4 - F. Jonan and G. Shirone, *Ferroelectric Crystals*, Pergamon Press, London/Oxford 1962
- 5 - K. Kobayashi, *J. Phys. Soc. Japan*, 24, 497 (1968)

Determinação dos parâmetros de transferência de energia Er→Ho e cálculo de ganho do meio laser ativo Er:Ho:YLF.

TARELHO, L. V. G.; GOMES, L.; COURROL, L. C.; CAMARGO, M. B. DE; MORATO, S. P.
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares- São Paulo

Foi realizado um estudo preliminar no sistema Er:YLF quanto à dependência do número de fótons do canal luminescente correspondente ao nível $^4I_{13/2}$ em função da concentração de Er com o qual se determinou a concentração ideal de Er (35 - 50%) para a sensitização do nível 5I_7 do Hólmio. As interações entre pares (Er^*-Er) são responsáveis pelo favorecimento da população do estado $^4I_{13/2}$, nível que transfere energia de excitação para o 5I_7 do Hólmio, propiciando condições de ação laser em 2064 nm. A eficiência de população (η_p) do nível $^4I_{13/2}$ foi primeiramente determinada num cristal Er(40%):YLF onde verificou-se uma forte dependência com a temperatura ($\eta_p = 1.4$

a 150 K). Pretendemos fazer o mesmo estudo para um cristal de Er(50%):YLF a fim de se determinar η_p que juntamente com a utilização dos dados da literatura sobre as eficiências de transferência de energia ($Er \rightarrow Ho$) η_t para o sistema Er(50%):Ho(1, 3, 5%):YLF, permitirá o cálculo de ganho de um bastão típico para uma cavidade ressonante para ação laser em 2064 nm do sistema Er(50%):Ho(x%):YLF bombeado por uma lâmpada flash de Xenônio típica (450 Torr, 3100 A/cm²). Desse modelo podemos extrair a concentração ideal de Hólmio para a ação laser do sistema codopado com 50% em 2064 nm e a melhor temperatura de operação em função do ganho de bastão para uma otimização do limiar de ação laser. Apoio Finep/Fapesp.

Caracterização do Ho em cristais de YLF e sua análise para ação laser

PEIRO, G. P.; TARELHO, L. V. G.; GOMES, L.; RAMIERI, I. M.; MORATO, S. P.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN / CNEN / SP

Lasers de estado sólido baseados em terras raras são de considerável interesse devido a possibilidade de obtenção de altas densidades de energia em sistemas relativamente simples. Por outro lado, emissão no infravermelho próximo tem atraído a atenção a vários anos como resultado da demanda por fontes laser eye-safe com baixa atenuação atmosférica. Além do Nd, outros lasers de interesse atualmente são os baseados nos íons de Er, Tm e Ho, sendo este último possuidor de potencial para aplicações como fonte para amplificadores operacionais sintonizáveis, telemetria, processos industriais e Medicina. Deste modo, verifica-se a importância da caracterização destes íons em matrizes cristalinas para se obter a máxima eficiência laser. Este trabalho reporta a análise da variação da concentração de Ho em cristais de $LiYF_4$ (YLF) e as possíveis configurações para se obter sua ação laser. Como início do tratamento dos resultados espectroscópicos, utilizaremos uma cavidade criogênica para o estudo da operação laser contínua, em cascata, à baixas temperaturas. Para continuidade, levaremos em consideração as linhas de absorção do Ho:YLF para as prováveis fontes de bombeio ressonante, tais como lasers de diodo. Além disso é feita uma pequena análise dos sensitizadores utilizados atualmente e futuras alternativas de acordo com as aplicações de interesse.

Apoio financeiro: FAPESP, CAPES

Caracterização Óptica do Quartzo

BEMELMANS, D.; CORTEZ AO, S. U.; BLAK, A. R.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

No presente trabalho são caracterizadas diversas amostras de quartzo através de espectroscopia óptica. Os espectros de absorção apresentam bandas nas regiões do

infra-vermelho, visível e ultra- violeta. Nossos estudos mostram que o alumínio é uma das impurezas dominantes e que os íons de Si^{4+} são substituídos por íons de Al^{3+} (no quartzo fumê) ou por íons Fe^{3+} (na ametista), necessitando, portanto, de cargas compensadoras fornecidas, nesse caso, por impurezas intersticiais (H^+ , Li^+ , Na^+) ou por lacunas armadilhadas em íons de oxigênio. A carga compensadora está, normalmente, localizada numa posição adjacente a cada íon de alumínio substitucional dando origem aos centros $[AlO_4/H^+]^0$, $[AlO_4/Li^+]^0$, $[AlO_4/Na^+]^0$ ou $[AlO_4]^0$. As amostras coloridas de ametista e quartzo fumê apresentam bandas acentuadas no infra-vermelho na região entre 3370 e $3310cm^{-1}$, que estão associadas aos centros $Al-OH^-$. Quando as ametistas são tratadas termicamente sua cor violeta se altera, variando do amarelo-avermelhado ao verde. A reversibilidade térmica desse processo está restrita a temperaturas inferiores a $600^\circ C$. Verificamos que tratamentos térmicos acima de $550^\circ C$ eliminam completa e permanentemente a cor, ficando a amostra opaca.

EFEITO DAS IMPUREZAS SOBRE A EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DA CALCITA

MARTINS, G. O.; VALÉRIO, M. E. G.; LIMA, J.
F. DE
UFS

Neste trabalho estamos estudando o efeito do Mn^{2+} e Mg^{2+} nas emissões termoluminescentes da calcita ($CaCO_3$). A calcita é a forma mais estável do carbonato de cálcio possuindo simetria trigonal. Estamos

crescendo amostras de calcita pura, dopadas com 2% de $MnCl_2$ ou $MgCl_2$ e com 1% de cada um destes cloretos pelo método da precipitação. Utilizamos as soluções bases de carbonato de amônio $((NH_4)_2CO_3)$ $0,25M$ e cloreto de cálcio ($CaCl_2$) $0,162M$ em diferentes proporções. Os três parâmetros importantes que controlam o tamanho dos microcristais produzidos são: a temperatura, a proporção das duas soluções básicas e a velocidade com a qual são misturadas estas duas soluções. Através do controle via observação em microscópio, verificamos que os maiores grãos com tamanho médio de $0,033mm$, foram obtidos com a proporção de 1:2 (1 de cloreto de cálcio para 2 de carbonato de amônio) à temperatura de quatro graus Celsius e gotejando as soluções com o uso de buretas. As amostras depois de preparadas, foram peneiradas onde selecionamos os microcristais compreendidos entre $0,075mm$ e $0,149mm$, e separamos em 4 lotes: lote 1-amostras mantidas da forma como saíram do crescimento, lote 2-amostras submetidas a uma dose de $5Gy$ de radiação γ do ^{60}Co , lote 3-amostras tratadas termicamente a $400^\circ C$ por 1 hora e, lote 4-amostras tratadas termicamente e submetidas à mesma dose de radiação. As medidas de termoluminescência (TL) realizadas em amostras puras, dopada só com manganês ou magnésio e dopada com estes dois íons distribuídos nos 4 lotes, revelaram comportamentos que podem ser interpretados em termos dos diferentes tipos de defeitos gerados por estes dois íons. Comparações com a emissão TL de amostras naturais de calcita permitem a identificação dos responsáveis pelas emissões deste material. (Apoio CNPq)

CRISTALOGRAFIA

Aplicações da Radiação Síncrotron (CRI) - 08/06/94

Anomalous small-angle X-ray scattering studies of amorphous metal-germanium and metal-silicon thin films

BIENENSTOCK, A.

Stanford Synchrotron Radiation Laboratory M.S.69, P.O.Box 4349, Stanford, CA 94309, USA

Sputtered amorphous M_xGe_{1-x} and M_xSi_{1-x} films (M=Fe, Mo and W) are among the very few examples of systems believed to undergo insulator-to-metal transitions with increasing x while remaining homogeneous. Consequently, their properties have been studied extensively. Several years ago, however, EXAFS and differential anomalous scattering studies hinted strongly that the M_xGe_{1-x} materials are phase separated on a very fine (< 4nm) scale in the insulator-metal transition region ($0 < x < 0.21$). Attempts to confirm this with small angle x-ray scattering (SAXS) were less than definitive because the SAXS could arise from defects. In this work (with M.J. Regan, M. Rice and M. Fernandez van Raap), anomalous SAXS (ASAXS) measurements have been made of many sputtered samples in the M_xGe_{1-x} (M=Fe, Mo and W) and the Fe_xSi_{1-x} systems, with the following results.

- (1) All the samples we have studied are phase separated on a 1-2 nm size scale.
- (2) If it is assumed that one phase is α -Ge or α -Si, the composition of the other phase can be determined from the ASAXS.
- (3) The observed ASAXS cannot be fit by a columnar structure.
- (4) The average sizes and shapes of the phase separated regions can be determined reasonably well by three-dimensional SAXS. They are typically of the order of 1 nm diameter in the growth plane and 1.5-2.0 times that in the growth direction.
- (5) Generally, the germanide or silicide "particles" are surrounded by a well-defined depletion region and there are correlations with more distant particles in the growth-plane. In contrast, there is a weak or nonexistent depletion region and correlation, on average, in the growth direction.
- (6) The sizes, shapes and correlations can be changed with changes in deposition conditions.

These observations indicate that the metal-insulator transition is probably an unusual percolation process on a very fine scale. They also indicate that a spinodal decomposition picture or theory of the phase separation during film growth must take into account fluctuations which interrupt the separation pattern, as well as those which initiate it. Finally, they indicate that one now has the ability to vary the phase separation topology, characterize those variations in spite of the small sizes involved, and study the resulting changes of physical properties.

Recent developments in the use of Synchrotron Radiation for resonant nuclear scattering

SIDDONS, D. P.

NSLS, Brookhaven National Laboratory Upton, New York 11973, U.S.A.

Resonant nuclear scattering from nuclei is evolving from an interesting curiosity into a tool which is useful in condensed matter physics. The number of nuclear species accessible to the technique is slowly growing, and the newer sources of synchrotron radiation being constructed or commissioned promise significant advances in the range of samples which will be able to be studied. The talk will describe the recent developments and discuss the future prospects.

ESTAÇÃO (LINHA) "DIFRAÇÃO DE RAIOS X" PARA O ANEL UVX DE LUZ SÍNCROTRON DO LNLS/CNPq

CUSATIS, C.

*Departamento de Física, Univ. Federal do Paraná
MACCARI, F. R.*

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, LNLS/CNPq

Uma estação dedicada a técnica de difração de raios x está sendo projetada e desenvolvida em colaboração entre o LNLS e o grupo de óptica de raios x e instrumentação (GORXI) da UFPr. Pretende-se que a estação seja dedicada, principalmente, ao estudo e ca-

racterização de materiais e heteroestruturas por difração de raios x, a ser desenvolvidos pelos vários laboratórios e grupos de pesquisa que já manifestaram e, também, pelos que vierem a manifestar interesse na utilização desta estação. Podendo operar na faixa de 1 a mais de 10 keV e utilizando como fonte um "wiggler" de 11 pólos / 2T de campo e com 100 mA do feixe de elétrons a 1,37 GeV, o fluxo deverá ser maior que 10^{13} fótons/(s.10mrad.0,1%BW) em 10 keV e acima de 10^{14} em 1 keV. O monocromador duplo-cristal para a linha foi desenvolvido e testado com luz síncrotron também em colaboração entre o GORXI e o LNLS. O segundo cristal deste monocromador deverá ser focalizante (no plano sagital) captando 10 mrad do feixe. O equipamento básico da estação será um difratômetro com duas configurações: múltiplos eixos, para monocristais e heteroestruturas, e goniometria teta-2teta, para amostras policristalinas. A configuração de múltiplos eixos encontra-se em fase de desenvolvimento. Em baixas energias (< 4 keV) a estação irá operar, inicialmente, em vácuo primário e, em energias mais elevadas, na pressão atmosférica. Pretende-se minimizar a absorção de fótons de 1 keV na janela de separação entre o vácuo da máquina e o vácuo primário do monocromador-estação pela escolha cuidadosa do material e da espessura da janela.

MONOCROMADOR REFRIGERADO PARA A ESTAÇÃO EXAFS-DIFRAÇÃO DO LNLS

DÜRR, J.; TOLENTINO, H.

Labórtorio Nacional de Luz Síncrotron-Campinas

DOHI, A.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron-Campinas

Para aumentar o fluxo de fótons na faixa de energia do raio X, um elemento de inserção "Wiggler" será instalado no anel de armazenamento do LNLS. A estação de EXAFS-Difração, que utilizará um monocromador duplo-cristal a 21 metros da fonte, se beneficiará do alto fluxo de fótons deste elemento de inserção. Por esta razão, os elementos óticos têm que suportar uma carga térmica significativa (20 Watts nas condições normais de funcionamento do anel e no caso de uma abertura angular de 4 mrad). Neste sentido, um novo monocromador de dois cristais, tipo saída fixa [1] com refrigeração do primeiro cristal, foi construído. O primeiro cristal é fixo no eixo de rotação do monocromador permitindo o posicionamento de um bloco de cobre resfriado por água ou nitrogênio. Para deixar constante a posição do feixe na saída quando o ângulo de Bragg muda, foi desenvolvido um novo sistema de translações sobre o segundo cristal. Baseado no princípio das mesas elásticas [2], esse sistema permite dois movimentos em duas direções perpendiculares entre si. Para corrigir o desalinhamento entre os cristais, introduzido pelas translações, uma bobina eletromagnética ajusta o ângulo do segundo cristal em relação ao primeiro.

Os cristais monocromadores são de tipo silício 111 e o ângulo de Bragg pode variar entre 9 e 59 graus permitindo varrer a energia na faixa de 12.6 a 2.3 KeV. Serão apresentados nesse trabalho testes de estabilidade mecânica do monocromador, da varredura em energia do sistema e da eficiência do bloco de resfriamento.

[1] M. C. Correa, H. Tolentino, A. Craievich, C. Cusatis, *Rev. Sci. Ins.* 63, 896 (1992).

[2] V. H. Etgens e C. Cusatis, X reunião da Sociedade Brasileira de Cristalografia, Campinas (1988).

X-ray backdiffraction experiments in thin Si single crystal using two- and four-crystal monochromators

CUSATIS, C.; MAZZARO, I.; UDRON, D.

Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná

GILES, C.

ESRF - Grenoble - France

TOLENTINO, H.

LNLS/CNPq - Campinas

An experimental set-up for X-ray backdiffraction regime studies using synchrotron radiation is presented. This set-up allowed us to analyze simultaneously for a single crystal the "o" and "h" backdiffracted beams. A highly monochromatized X-ray beam was delivered, in a first experimental configuration, by a two-crystal Si (111) monochromator, and, in a second configuration, by a four-crystal Si (111) monochromator, both of them installed on the D45 station of the DCI/LURE synchrotron facility (France). The monochromatized beam was then diffracted by a thin Si (111) blade. Diffraction profiles near and exactly at $\pi/2$ were obtained by varying the blade temperature. The "h" reflected and "o" transmitted beam were detected respectively by a ionization chamber, placed between the monochromator and the blade, and a solid state detector, after the blade. The two-crystal monochromator, with monolithic conception using elastic translators, was used in Bragg angles very near $\pi/2$. All the Si (111) harmonics were diffracted by the blade, the main one being the Si (444). The Si blade diffraction profile was studied for diffraction angles starting from 89° until 90° , and until the complete disappearance of the diffraction profile. With this set-up, it was possible to measure simultaneously for all the harmonics the evolution of the "o" profile when the diffraction angle was varied. The four-crystal Si (111) monochromator was set at Bragg angle around 48° with the (333) monochromatic beam diffracted by the Si(444) plane of the thin blade at around 90° . We have studied the evolution of the backdiffracted profile with the blade diffraction angle, and analyzed the transmitted beam spectral composition in this case. The great advantage of this second set-up is to eliminate harmonics and to allow the study of the backdiffraction regime for other Si diffraction planes, as well as for other crystalline structures, including

mosaic crystals.

A ESTAÇÃO DE EXAFS DO LNLS

ALVES, M. DO C. M.; DURR, J.; TOLENTINO, H.

LNLS - Caixa Postal 6192

TAMURA, E.

LNLS - Caixa Postal 6192

GUEDES, G.

LNLS - Caixa Postal 6192

A espectroscopia de absorção de raios X é uma técnica amplamente utilizada na caracterização de materiais. A seção eficaz de absorção de um átomo selecionado em um material apresenta estruturas finas próximas a borda de absorção (XANES- X Absorption Near Edge Structure) e oscilações (EXAFS - Extended X Absorption Fine Structure) que contêm informações sobre o estado de oxidação, simetria do arranjo local, densidade parcial de estados vazios, número de coordenação e distância dos átomos vizinhos. Esta técnica será implantada no LNLS, sendo que os componentes da estação experimental vem sendo desenvolvidos já a algum tempo. Esta estação funcionará na região de energia de raios-X duros (4-12 keV) o que permitirá o estudo das bordas K e L de vários elementos da tabela periódica. O LNLS pretende estender a utilização desta técnica ao estudo dos mais variados sistemas e desta forma esta experiência contará com a infraestrutura adequada às diferentes necessidades. Na linha de EXAFS será utilizado um wiggler, o que garantirá um alto fluxo de fótons ($\approx 3 \times 10^{11}$ fótons/smrad.1%BW a 10 keV) na região de energias mencionado, um espelho focalizante, monocromadores (2 e 4 cristais) e sistema de detecção (câmaras de ionização, detector de elétrons e de fluorescência). Será então possível analisar elementos presentes em amostras de baixa concentração. Esta técnica é geralmente utilizada no estudo de filmes finos, multicamadas, vidros, semicondutores, catalisadores, complexos inorgânicos, moléculas biológicas, sistemas eletroquímicos in-situ.

Cristalografia Geral (CRI) - 08/06/94

MINERAIS INTERESTRATIFICADOS COMO CRISTAIS UNIDIMENSIONAIS

BATISTA, W. O. G.; BARAN, Z.

UFBA

Nosso interesse por cristais unidimensionais vem de recente colaboração com o Instituto de Geociências da UFBA onde a análise estrutural de minerais argilosos por difração de raios-x é o principal problema de identificação. Os minerais argilosos mais freqüentemente

encontrados na natureza são os silicatos de alumínio de estrutura laminar com estratos mixtos ou interestratificados, compostos de camadas tetraedricas de Si^{4+} e octoedricas de Al^{3+} . Os planos de estratos determinam os planos reticulares (001) e apenas na direção perpendicular a este plano existe uma periodicidade. Encontrase os minerais formados por empilhamento de dois ou mais tipos de estratos sucedendo-se de maneira mais ou menos ordenada. Suas estruturas podem ser descritas em termos dos modelos estatísticos nos quais o conteúdo dos estratos e o modo de seu empilhamento são expressos através dos parâmetros de probabilidade de uma distribuição de espaçamentos entre os estratos. Deste modo a distribuição de dois tipos de estratos pode ser descrita por um simples modelo de Ising em uma dimensão. Segundo Zen¹ existe um "gap" nos conceitos entre os parâmetros cristalograficos medidos por difração de raios-X e os parâmetros termodinâmicos que lidam com a energia e o "status" de fases nos cristais. O modelo de Ising fornece então conexão direta entre esses dois tipos de parâmetros. Nesta comunicação serão discutidos os propositos de nosso trabalho que visa obter um espectro de difração de raios-X de uma amostra de caolinita-esmectita e determinar pelo método de MacEvan², diretamente através da transformada de Fourier, as probabilidades de encontrar as seqüências de empilhamento de estratos. Logo tentaremos avaliar a energia de interação entre dois estratos que poderia responder a questão de quais das estruturas interestratificadas são mais prováveis por razões energéticas. Refer.(1)-Zen,E-an (1967) Am.Mineral.52,635-660 (2)-MacEvan,D.M.C.(1980) Chapter4 in Crystal Structures of Clay Minerals their X-Ray Identification, Ed.G.W.Brindley and G.Brown,Mineralogical

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X COM INCIDÊNCIA RASANTE

CAVALCANTI, L. P.; TORRIANI, I. L.

IFGW - UNICAMP

A caracterização estrutural de filmes finos é considerada parte essencial do desenvolvimento de dispositivos eletrônicos. Entre os métodos experimentais mais eficientes para esta caracterização, a difração de raios-x ocupa um lugar predominante por seu caráter não destrutivo e por permitir a análise de áreas extensas. A geometria convencional nas experiências de difração de raios-x é a reflexão simétrica ou de Bragg-Brentano com varredura θ - 2θ donde se obtém informações importantes sobre análise de fases, orientação preferencial, dimensão dos grãos cristalinos, tensão na rede dos grãos. Mas essa técnica resulta limitada porque a reflexão simétrica permite a análise apenas dos conjuntos de planos paralelos ao substrato tanto em monocristais como em policristais. Mostra-se ainda bastante ineficiente quando, independentemente de sua orientação

ou cristalinidade, os filmes possuem espessuras menores que 500Å. Nesses casos, a técnica de difração com incidência rasante pode-se mostrar muito eficaz em experiências com filmes ultrafinos. Com esse tipo de geometria a reflexão será assimétrica com referência à superfície do filme. Além da principal vantagem, que é a subtração por completo da intensidade difratada pelo substrato, é possível obter informação sobre a estrutura de filmes epitaxiais em direções não paralelas à interface. E ainda, em filmes policristalinos com presença de mais de uma fase, é possível fazer análise em função da profundidade e concluir sobre sua composição e textura desde a superfície até a interface, variando o ângulo de incidência. Serão apresentados resultados sobre filmes ultrafinos policristalinos com espessuras que podem variar entre 30 e 500Å. E ainda o estudo do perfil de profundidade em filmes epitaxiais com camadas múltiplas. CNPq.

A INFLUÊNCIA DO FLUXO DE OXIGÊNIO NAS PROPRIEDADES ELETROCRÔMICAS DE FILMES FINOS DE ÓXIDO DE NÍQUEL

FANTINI, M. C. A.

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

GORENSTEIN, A.

Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, SP

Filmes finos eletrocrômicos de óxido de níquel sobre substrato de vidro, recoberto com óxido de estanho, foram crescidos por "sputtering" reativo, assistido por rádio frequência, em diferentes fluxos de oxigênio. Variações no fluxo de oxigênio acarretam mudanças nas propriedades estruturais e na estequiometria dos filmes, que estão relacionadas com o desempenho eletrocrômico do material. As amostras foram caracterizadas por voltametria cíclica, transmitância óptica e difração de raios-X. As medidas foram efetuadas para amostras em estado claro e escuro, sendo que a intercalação eletroquímica ocorreu em solução aquosa 0,1M de KOH. Para fluxo de oxigênio (ϕ) de 0,5 sccm/min, deposita-se níquel metálico. Para $\phi = 1,0$ sccm/min, o filme depositado é óxido de níquel policristalino com orientação preferencial de crescimento na direção dos planos (012) da rede hexagonal deste composto e possui coloração clara. Para os demais fluxos ($\phi = 2,0; 4,0; 6,0$ sccm), os filmes apresentam orientação cristalográfica preferencial na direção dos planos (101) e coloração escura. O parâmetro de rede na direção do eixo-c e o tamanho de grão dependem do fluxo de oxigênio. Após vários ciclos de clareamento/escurecimento os filmes apresentam a mesma variação de transmitância óptica, o que é atribuído às diferenças químicas e estruturais.

DIMENSÃO MÉDIA E TENSÕES INTERNAS NA REDE DOS GRÃOS NANOCRISTALINOS FORMADOS A PARTIR DA LIGA Fe-Cu-Nb-Si-B.

SANTOS, D. R.; TORRIANI, I. L.

IFGW, UNICAMP

KNOBEL, M.

IENGF, Itália

As propriedades magnéticas de nanopartículas cristalinas imersas numa matriz amorfa são diferentes das conhecidas para o material "bulk". Ao sucesso na obtenção de um material com excelentes propriedades magnéticas em 1988^(a), seguiu-se uma série de trabalhos procurando caracterizar este material a nível atômico. Trata-se da liga metálica de composição inicial Fe_{73,5}Cu₁Nb₃Si_{13,5}B₉ que, após ser submetida a tratamento térmico específico (tipicamente 60 min a 540°C) apresenta-se na forma de grãos nanocristalinos Fe(Si) embutidos em uma matriz amorfa. As propriedades magnéticas de interesse (baixa coercividade, baixa magnetostricção, alta permeabilidade) estão fortemente relacionadas ao tamanho dos grãos cristalinos e tensões internas, o que motivou esforços para determinar os fatores que permitem controlar o crescimento das partículas. Realizamos recentemente um estudo da fração volumétrica cristalina ν_{cr} , tamanho médio dos grãos \bar{L} e microtensões internas ϵ_{rms} em vários estágios do processo de cristalização, através de métodos de análise de linha de difração de raios-x^(b). Neste trabalho, o estado final nanocristalino (caracterizado pelos parâmetros ν_{cr} , \bar{L} e ϵ_{rms}) é avaliado em função dos parâmetros de preparação das amostras: taxa de resfriamento da fita amorfa, tempo e temperatura de tratamento térmico. Os resultados mostram que o estado final é sensível a estes fatores, e indicam que as condições ideais para a obtenção das melhores propriedades magnéticas são taxas de resfriamento intermediárias e altas temperaturas de tratamento térmico. CNPq.

^aY. Yoshizawa, S. Oguma, K. Yamauchi - J. Appl. Phys., 64, 6044 (1988).

^bM. Knobel, D. R. dos Santos, I. L. Torriani, R. S. Turtelli - Nanostruc. Materials, 2, 399 (1993).

ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE CONTRA-ÍONS EM TORNO DA SUPERFÍCIE DE MICELAS ESFÉRICAS

ITRI, R.

IFUSP

CHEN, S.

Massachusetts Institute of Technology

Foram realizadas medidas de espalhamento de Raios-X (Oak Ridge, USA) e de nêutrons em baixos ângulos (Brookhaven, USA) de soluções aquosas de octil, decil e dodecil sulfato de Cs e dodecil sulfato de Na e Li,

em várias concentrações diferentes, para avaliarmos a influência e a distribuição de contra-íons ao redor da superfície de micelas esféricas. As curvas de espalhamento de nêutrons são modeladas como um produto do fator de forma e de interferência entre micelas, fornecendo a informação da forma e tamanho micelar. A distribuição de contra-íons é incorporada no modelo para análise das curvas de Raios-X, onde a equação de Poisson-Boltzmann é resolvida num modelo de cela.

*Workshop: Sistemas Quasi-Periódicos
I (CRI) - 10/06/94*

20 YEARS OF QUASI-CRYSTALLOGRAPHY

JANSSEN, T.

Institute for Theoretical Physics, University of Nijmegen

In 1972 Prof. de Wolff from Delft analyzed his diffraction data on the γ -phase of Na_2CO_3 in terms of a space group in 4 dimensions. It turned out that a similar way of doing could be used for other incommensurately modulated crystal structures as well. The number of such IC phases known nowadays is very big, and the phenomenon of incommensurability has turned out to be very common. Sometimes one has to go to space groups in more than four dimensions. Later on also incommensurate composite structures, like misfit compounds and intercalates, were discovered and could be treated as well with higher-dimensional space groups. Finally one discovered in 1984 the quasicrystals, and from the beginning these were described in more than three dimensions as well. A discussion will be given of the development of the symmetry concept for quasiperiodic systems since 1972. This will be exemplified on a number of specific quasiperiodic structures. From the beginning of the investigations on IC phases one has realized that an alternative description would be one that remains in physical 3-dimensional space. It has been shown that these approaches are equivalent, but each of them has its own advantages. The relation of the two approaches will be discussed. Besides quasiperiodic systems there are other well ordered structures in nature. A first classification can be given in terms of the type of the diffraction spots. A finer classification runs from lattice periodic crystals to fully disordered systems. Although one has not (yet) found examples of all classes in nature, the study of their structure and the consequences of that for physical properties is interesting. The physical properties of quasicrystals and incommensurate crystal phases are different from those of normal crystals. The special effects will be illustrated with phonon excitations in such systems.

FRUSTRATION ON THE TRIANGULAR LATTICE AND INCOMMENSURABILITY

PIMENTA, M. A.; LICINIO, P.

Departamento de Física - UFMG, Caixa Postal 702 - 30161-970 Belo Horizonte

Incommensurate structures often arise as a compromise when some kind of frustration is present. In insulators, it is a consequence of the competition between antagonistic short-range forces. A number of compounds of the A_2BX_4 family presents incommensurate phases. The most studied of them, like for example K_2SeO_4 and Rb_2ZnBr_4 , have in common an orthorhombic high temperature phase (space group $Pcmn$) and the incommensurate modulation is along the pseudo hexagonal c-axis. Microscopic models which account for the competition between nearest and next-nearest neighbours (extended ANNNI models) have described important features observed in these compounds. However, there are compounds of this family, like K_2MoO_4 , K_2WO_4 and $LiKSO_4$, which have a hexagonal high temperature phase (space group $P6_3mmc$) and the modulation is in the plane perpendicular to the hexagonal c-axis. In a previous study ^a we have proposed that frustration in a triangular lattice of "gears" formed by the BX_4 groups could be the cause of the incommensurate modulation. This kind of frustration is very similar to the one found on antiferromagnetic Ising model in a triangular lattice. Notice that it involves only nearest-neighbours and is uniquely related to the symmetry of the lattice. In order to check this model, we have performed numerical simulations implemented as a Cellular Automaton (CA). A continuous spin variable S_{ij} which can assume any real value is associated to each lattice site with coordinates (i, j) . In the context of a lattice of "gears", S_{ij} corresponds to the angular momentum of these "gears". The initial configuration is such that each spin variable S_{ij} takes a random real value between -1 and +1. The values of S_{ij} are then simultaneously updated depending on the values of S_{ij} and S_{nn} in the previous configuration according to the following rule:

$$S_{ij}^{t+1} = (1 - p)S_{ij}^t - p(S_{nn}^t) \quad (1)$$

where $\langle S_{nn}^t \rangle$ is the six nearest-neighbours average spin, and p is a parameter which measures the strength of the coupling between neighbours. Initially disordered lattices are seen to organize into modulated patterns by the iterative application of Eq.(1). We considered situations where the CA algorithm is isotropic in the lattice directions as well as where it is anisotropic. It is shown that frustration on the triangular lattice is not a sufficient condition for the appearance of an incommensurate modulation; anisotropy, which breaks the hexagonal symmetry of the lattice, must also be introduced. There is a commensurate-incommensurate phase transition as the parameter describing the magnitude of the anisotropy is increased. Besides, the model exhibits a critical value p_c for the coupling parameter, which is the limit of stability for the modulated structures.

^aPhys.Rev.B vol 39 (1989) pp 3361

MAGNETISMO EM QUASECRISTAIS:LEI DE ESCALA E UNIVERSALIDADE

MACHADO, F. L. A.; MARTINS, C. S.

UFPE

As ligas quasicristalinas de $Al : Mn$ apresentam propriedades tipo vidro de spin. Várias grandezas, como a susceptibilidade dc não-linear, χ_{NL} , e a susceptibilidade ac , χ_{ac} , obedecem leis de escalas com expoentes críticos iguais aos de outros vidros de spin canônicos. Por outro lado, há indicações que a magnetoresistência dessas ligas escalam com a magnetização $M(T, H)$ seguindo uma lei de potência M^n onde $n = 2$. Modelos teóricos para o magnetismo de quasicristais também predizem que a dinâmica desses sistemas é não-universal. Nessa comunicação, discutiremos resultados obtidos por nós anteriormente e alguns experimentos que estão em andamento para elucidar esses e outros pontos ainda não esclarecidos.

Trabalho financiado parcialmente pelo CNPq, FACEPE e FINEP/PADCT.

Workshop: Sistemas Quasi-Periódicos
 II (CRI) – 10/06/94

SEQUÊNCIAS DE FIBONACCI ASSOCIADAS A SIMETRIAS EM QUASI-CRISTAIS.

FRANCO, B. J. DE O.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

SILVA, F. W. O. DA

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa

Após a descoberta da fase quasi-cristalina pentagonal Al-Mn em 1984 o interesse em sistemas quasi-periódicos cresceu rapidamente. Além da simetria pentagonal foram recentemente obtidas ligas com simetrias octogonais, decagonais, duodecagonais e fases quasi-cristalinas 1D (fases Fibonacci) como por exemplo a fase GaAs-AlAs crescida por MBE ("molecular beam epitaxy"), consistindo de camadas alternadas de GaAs e AlAs de acordo com uma sequência de Fibonacci de segunda ordem. Sequência de Fibonacci de terceira ordem foi considerada recentemente no estudo do padrão de difração desta rede, crescida por MBE, das camadas semi-condutoras $A = AlAs$, $B = Al_{0.5}Ga_{0.5}$ e $C = GaAs$. Outro trabalho que usou sequência de Fibonacci de terceira ordem foi feito recente por um de nós (Franco, 1993). No presente trabalho apresentamos uma nova simetria heptagonal quasi-periódica do plano associada a uma sequência de Fibonacci de terceira ordem bem como uma simetria eneagonal quasi-periódica do plano associada a uma sequência de Fibonacci de quarta ordem. Ambas as simetrias, além de apresentarem auto-similaridade, são rotacionalmente invariantes sendo translacionalmente quasi-periódicas.

Franco, B. J. O. (1993). Phys. Lett. A, **178**, 119-122.

ESTRUTURAS MODULADAS E TRANSIÇÕES DE FASE CRISTALOGRÁFICAS

SPEZIALI, N. L.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Uma maneira frequente de se identificar a existência de estrutura modulada é através de difração em monocristais: a presença de reflexões satélites associadas às reflexões principais caracteriza a modulação e o vetor de onda \mathbf{q} . Em geral, estruturas moduladas displacivas aparecem numa sequência de transições de fase termotrópicas sendo uma modulação incommensurável caracterizada pela variação na posição relativa dos satélites em função da temperatura, ou seja, $\mathbf{q} = \mathbf{q}(T)$. Um método de descrever a estrutura de cristais modulados se baseia no conceito de supercristal o qual é descrito num espaço de dimensão $3+d$. No caso de modulação displaciva, a posição \mathbf{r}_i dos átomos é modulada por um vetor de deslocamento periódico \mathbf{u}_i . Em vários compostos, sobretudo do tipo A_2BX_4 e semelhantes, ao se baixar a temperatura observa-se a seguinte sequência de transições de fase:

Fase Normal $\xleftrightarrow{T_1}$ Fase Incommensurável $\xleftrightarrow{T_2}$ Fase Comensurável

Algumas características quanto ao vetor de modulação, relação grupo \longleftrightarrow sub-grupo e existência de geminação nas diferentes fases são comuns a esses compostos. Um resumo de alguns resultados conhecidos será apresentado.

Cristalografia Inorgânica; Transições de Fase e Quasi-Periodicidade (CRI)

– 10/06/94

MODELAMENTO DA REFLETIVIDADE EXPERIMENTAL DE SUPER REDES DE α -Si:H/ α -Ge:H MEDIDA POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

VELASQUEZ, E. L. Z.; FANTINI, M. C. A.
Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

Sistemas de multicamadas amorfas de α -Si:H/ α -Ge:H foram estudadas por difração de raios-X. As amostras, crescidas por descarga luminescente, com períodos entre 37 Å e 232 Å, foram depositadas sobre vidro e Si monocristalino para analisar o efeito da qualidade do substrato nas propriedades estruturais das multicamadas. Em trabalho anterior apresentamos os resultados experimentais comparados com simulações teóricas das intensidades difratadas, considerando sistemas de bicamadas, para os casos de: interface abrupta, gaussiana, tipo seno e com variação na espessura das camadas para avaliar as imperfeições nas super-redes decorrentes de não uniformidade em espessura, mistura de materiais e rugosidade na interface. Neste trabalho apresentamos um modelo que considera uma terceira camada constituída pela mistura dos materiais na interface e, adicionalmente, introduzimos uma variação aleatória da ordem de ± 4 Å na espessura das camadas. Desta forma, os efeitos de mistura de materiais na interface e de não periodicidade podem ser analisados separadamente. Analisamos a influência da espessura das camadas individuais nas intensidades relativas dos picos

de difração, o efeito do feixe direto na intensidade dos picos, principalmente das primeiras ordens, e o efeito do "background" e das constantes ópticas dos materiais amorfos nas intensidades relativas das reflexões. Os resultados obtidos permitiram simular corretamente os dados experimentais.

DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DE SUPER-REDES MONOCRISTALINAS DE $\text{Ge/Si}_{0,3}\text{Ge}_{0,7}$

PALACIOS, H. T.; CARVALHO, C. A. M.; FANTINI, M. C. A.

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP
CERDEIRA, F.

Instituto de Física, UNICAMP, Campinas, SP

Super-redes monocristalinas de $\text{Ge/Si}_{0,3}\text{Ge}_{0,7}$, foram crescidas por "Molecular Beam Epitaxy" (MBE) sobre substrato monocristalino de Ge com planos (400) paralelos à superfície. As amostras foram analisadas por difração de raios-X a baixo ângulo e difratometria de raios-X de duplo cristal, utilizando radiação $\text{Cu K}\alpha$. Neste último caso, a monocromatização da radiação incidente foi feita por um monocristal de Si [100]. As super-redes estudadas foram crescidas com diferentes espessuras das camadas individuais e com um número de períodos entre 15 e 20. As medidas de difração a baixo ângulo forneceram a periodicidade da super-rede, a qual é comparada com os valores nominais fornecidos pelo fabricante, e também a parte real do índice de refração para os raios-X incidentes, que é comparada com o valor obtido a partir de cálculos teóricos. As "rocking curves" consistiram na obtenção de perfis de difração das reflexões simétricas (400) e assimétricas

(511). Os dados permitiram calcular a periodicidade da super-rede e os parâmetros de rede médios, perpendicular e paralelo à superfície. Foram também determinados os parâmetros de rede da camada "buffer" de Ge sobre o substrato. Os resultados obtidos das diferentes medidas foram comparados entre si, observando-se variações em torno de 0,1% entre os vários parâmetros de rede perpendiculares, os quais são menores que o correspondente valor do Ge, como era de se esperar para o caso de Si na liga. O parâmetro de rede paralelo à superfície correspondente à camada "buffer" é idêntico ao valor do substrato de Ge, enquanto que a super-rede apresenta uma distorção para valores maiores. Os resultados apontam para uma compressão da super-estrutura perpendicular ao substrato, com uma relaxação na direção paralela.

A DEPENDÊNCIA DO VETOR DE ONDA DE MODULAÇÃO COM A TEMPERATURA EM CALAVERITA

BALZUWEIT, K.

Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais

A calaverita ($Au_{1-x}Ag_xTe_2$, $x < 0.15$) é um cristal modulado incomensurável. Observado pela primeira vez em 1868 por Genth^a como um dos minerais presentes em diversas minas de ouro dos Estados Unidos e da Romênia. Desde sua descoberta, o cristal tem sido objeto de controvérsias. A razão principal destas controvérsias teve seu ponto mais alto em 1931 em um minucioso trabalho de Goldschmidt et al. (GPP)^b. Utilizando medidas realizadas em 105 cristais, GPP acharam um total de 92 formas morfológicas diferentes, impossíveis de serem agrupadas sob um único tipo de rede. Para indexar todas as formas com índices de Miller relativamente baixos, foram utilizadas cinco redes diferentes. Em 1979, Sueno et al.^c observaram reflexões satélite em padrões de difração de calaverita. E em 1985, Dam et al.^d resolveram o problema da indexação das 92 formas morfológicas diferentes ao admitir o cristal como modulado incomensurável de vetor de onda de modulação $q = -0.41a^* + 0.45c^*$. A calaverita, mesmo após resolvido o maior problema, apresenta aspectos extremamente interessantes, se comparada a outros cristais modulados. A amplitude máxima do vetor de onda de modulação é considerável; 4Å. E a aparente inexistência de qualquer transição de fase em relação à temperatura são os mais interessantes. No presente trabalho, apresentamos resultados preliminares de medidas do vetor de onda de modulação da calaverita em função da temperatura. Também foram utilizados cristais de três composições diferentes. Os resultados sugerem um pinning a alta temperatura (300°C).

^aF. A. Genth, Am.J. of Sci. II 45, 314 (1868).

^bV. Goldschmidt, C. Palache and M. Peacock, Neues Jahrb. Mineral. 63, 1 (1931)

^cS. Sueno, M. Kimata and M. Ohmasa, Modulated Structure-AIP Conference Proceedings 53, 333 (1979)

^dB. Dam, A. Janner and J. D. H. Donnay, Phys. Rev. Lett. 55, 2301 (1985)

SEQUÊNCIA DE FIBONACCI DE QUINTA ORDEM ASSOCIADA A UMA SIMETRIA UNDECAGONAL QUASI-PERIÓDICA DO PLANO.

FRANCO, B. J. DE O.; INÁCIO, E. C.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais.

SILVA, F. W. O. DA

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa.

Sequências de Fibonacci de segunda, terceira e quarta ordens são associadas, respectivamente, a simetrias pentagonais, heptagonais e enagonais quasi-periódicas do plano. Em trabalhos recentes mostramos que simetrias heptagonais e eneagonais quasi-periódicas do plano podem ser obtidas através do uso de polinômios ciclotômicos que nos conduziu, respectivamente, a equações do terceiro e quarto graus associadas a tais simetrias. Em cada caso, relações entre as raízes fornecem as transformações (regras de inflação) desejadas, bem como as relações de recorrência relativas a sequência de Fibonacci correspondente. Para o caso de uma simetria undecagonal do plano o uso de polinômios ciclotômicos nos leva a uma equação do quinto grau e tal simetria é associada a uma sequência de Fibonacci de quinta ordem. No presente trabalho obtivemos quatro equações do quinto grau cujas raízes são as diagonais distintas do undecágono e combinações destas. Relações entre as raízes nos forneceram transformações que através do uso de séries recorrentes nos permitiu obter relações de recorrências que definem sequências de Fibonacci de quinta ordem.

Estudo Cristalográfico do Cs_2HgBr_4 : Fases Normal, Incomensurável e Comensurável

SPEZIALI, N. L.; PINHEIRO, C. B.

UFMG

Cristais quasi-periódicos apresentam figuras de difração atípicas, onde podem ser observadas reflexões satélite próximas aos máximos principais característicos de uma estrutura normal. As reflexões satélite são associadas à incomensurabilidade existente no cristal, podendo ser devido a: modulação posicional (átomos periodicamente deslocados do que seriam suas posições originais), modulação ocupacional (probabilidade de ocupação de um sítio por um dado átomo) e estruturas compostas (dois ou mais sub-sistemas mutuamente incomensuráveis). Aqui, estão excluídos os quasi-cristais. Dentre os vários compostos que apresentam fases incomensuráveis, aqueles do tipo A_2BX_4 têm sido de par-

ticular interesse; eles apresentam, em geral, modulação posicional. Estamos realizando estudos cristalográficos do Cs_2HgBr_4 . Este composto apresenta cinco fases estruturalmente diferentes, são elas:

Fase I	fase II	Fase III	Fase IV
	Fase V		
Ortorrômbica \Rightarrow Incomensurável \Rightarrow Monoclínica \Rightarrow Monoclínica \Rightarrow Triclínica			
Tc ₁ = 245 K Tc ₂ = 232 K Tc ₃ = 167 K ?			

Estudos experimentais e teóricos têm sido realizados no intuito de entender e de tentar explicar os mecanismos responsáveis pela incomensurabilidade verificada nestes cristais. Pretendemos apresentar os parâmetros estruturais das fases I e III, bem como algumas características da modulação na fase incomensurável.

Estudo da Fase Incomensurável do Cristal de $LiKSO_4$ a Alta Temperatura
VENTURA, D. R.; PIMENTA, M. A.; SPEZIALI, N. L.
UFMG

O cristal de $LiKSO_4$ é conhecido por possuir um grande número de transições de fases quando se varia sua temperatura, tendo simetria hexagonal (grupo de espaço P_63) à temperatura ambiente. Esta fase permanece estável até $439^\circ C$. De $439^\circ C$ até $470^\circ C$ ele apresenta uma fase comensurável em que sua célula unitária é quadruplicada $a'_1 = 2a_1, a'_2 = 2a_2, c' = c$. Entre $470^\circ C$ e $675^\circ C$ ele apresenta uma fase incomensurável e, para valores acima de $675^\circ C$, uma nova fase da estrutura hexagonal (grupo de espaço P_63/mmc). Foram crescidos cristais de $LiKSO_4$ por evaporação lenta de uma solução aquosa à temperatura de $40^\circ C$. Apresentaremos resultados das medidas de difração de raio-X em monocristais de $LiKSO_4$ para temperaturas acima da ambiente.

ESTUDO ATRAVÉS DO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE DA INFLUÊNCIA DE HETERO-JUNÇÕES NO ESPALHAMENTO SIMÉTRICO DE BRAGG EM MULTICAMADAS SEMICONDUTORAS
VASCONCELOS, D. S. DE; KELLER, W. A.; ALVES, M. E. M. DA V.
UFBA

As multicamadas semicondutoras têm despertado o interesse dos pesquisadores em função da larga aplicabilidade na indústria eletrônica. A possibilidade de crescê-las artificialmente com configurações as mais diversas, inclusive com uma precisão de cada camada mono-atômica tem permitido a obtenção de um grande

número de amostras, e, conseqüentemente, aumentado em muito o trabalho de caracterizá-las. O formalismo auto-consistente utiliza como unidade de espalhamento um plano de dipolos submetido a um campo de ondas formado por duas ondas incidindo simetricamente, uma em cada lado do plano. Este modelo fornece, naturalmente, um tratamento trivial para qualquer tipo de estrutura que possa ser considerada como formada de planos de dipolos, quer seja periódica ou não. Desta forma a simulação de multicamadas semicondutoras construídas para atender à indústria semicondutora pode ser feita de maneira sistemática e com razoável simplicidade através de computadores de pequeno e grande porte. Neste trabalho estudamos a influência das hetero-junções nos perfis de difração de algumas configurações tipo InP+GaAs com substrato de InP e adaptamos o programa para considerar ligas do tipo GaAs/In(1-x)Ga(x)As(y)P(1-y).

ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASE NO COPOLÍMERO P(VDF/TrFE) 70:30: EVIDÊNCIAS DE TRÊS FASES CRISTALINAS.
SILVA, A. J. G. C.; FARIA, R. M. DE;
MASCARENHAS, Y. P.
Instituto de Física e Química de São Carlos, USP.

Copolímeros P(VDF/TrFE) em razões molares entre 80:20 e 52:48 são semicristalinos e ferroelétricos à temperatura ambiente. Apresentam transição de fase estrutural ferro-paraelétrica (F-P) num intervalo que vai de 70 a $120^\circ C$, sendo que a temperatura de transição F-P diminui com o aumento de TrFE na composição do copolímero. Medidas elétricas e dimensionais em função da temperatura têm dado evidências de que o copolímero de razão molar 70:30, em particular, apresenta, além da transição F-P amplamente descrita na literatura, uma transição intermediária, provavelmente para uma fase ferroelétrica de temperatura mais elevada que a fase β . Este trabalho visa o estudo estrutural desse copolímero através de difração de raios X a diferentes temperaturas, procurando entender o fenômeno observado por outros métodos (DSC, por exemplo) e determinar a existência ou não da fase cristalina ferroelétrica adicional, intermediária entre a fase β à temperatura ambiente e a fase paraelétrica acima de $120^\circ C$.

Estruturas, Técnicas e Instrumentação (CRI) - 10/06/94

CRYSTAL STRUCTURE OF 2,5-DIHYDROXY-6-ISOPROPYL-9-METHYL-1,8-OXY-TRICYCLO[8.4.0.0^{4,9}]-6-TETRADECENE REVEALS STRAINED CONFORMATIONS FOR RINGS

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Instituto de Física e Química de São Carlos

IULEK, J.

Departamento de Química - Universidade Estadual de Ponta Grossa - PR

During a research program aiming at the determination of a new synthetic approach for cembranes (natural compounds, presenting many biological activities, such as neurotoxins, citotoxins, anti-mitotic, anti-inflammatory, etc...), the middle ring double bond of the tricyclic system formed should be epoxidized with MCPBA in order to further obtain the cembrane basic ring structure. This reaction led to the formation of 2,5-dihydroxy-6-isopropyl-9-methyl-1,8-oxy-tricyclo[8.4.0.0^{4,9}]-6-tetradecene, a system formed by four fused rings, as determined by X-ray crystallography, in which they are structurally strained and, as a consequence, led to assume unusual conformations. The degree of straining, according to Cremer and Pople's puckering coordinates (JACS, 97, 1354-58, (1975)), and the respective ring conformations were evaluated by program CONFORMA. Crystal data: C₁₈H₂₈O₃ crystallizes in space group C2/c, with a=18.514(5)Å, b=10.576(1)Å, c=17.504(2)Å, β=110.72(2)°, Z=8, Dx=1.21gcm⁻³, μ(CuKα)=0.56mm⁻¹. The structure was refined to R=0.057 for 1570 reflections and 191 parameters. The ring puckering coordinates and respective conformations are: a-) cyclohexanoxic ring: q₂=0.167(4)Å, q₃=-0.489(4)Å, Q=0.517(4)Å, Θ=161.1(5)°, φ=2(1)°, hybrid between chair (higher proportion) and sofa conformation; b-) cyclohexanolic ring: q₂=0.302(4)Å, q₃=-0.569(4)Å, Q=0.644(4)Å, Θ=152.0(3)°, φ=127.0(7)°, hybrid between sofa (higher proportion) and chair conformation; c-) cyclohexenolic ring: q₂=0.413(4)Å, q₃=-0.289(4)Å, Q=0.504(4)Å, Θ=125.0(4)°, φ=157.6(5)°, distorted half-chair conformation; d-) oxolanic ring: q₂=0.437(4)Å, φ₂=82.0(4)°, hybrid between envelope and pure twist conformation. This work has received partial support from CAPES,UEPG, CNPq, FAPESP and FINEP.

Synchrotron radiation energy deposition in deep-etch (100-500 μm) lithography.

UGARTE, D.; TOLENTINO, H.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (CNPq/MCT), Cx. Postal 6192, 13081-970 Campinas SP.

In the early 80's, a process so-called LIGA (from the German: Lithographie, Galvanoformung, Abformung) was developed in the Karlsruhe Nuclear Research Center. This technique is based on deep-etch X-ray lithography using synchrotron radiation, and produces very precise microstructures. Typical generated sizes are in the order of several hundred microns high and some microns in lateral size, all with sub-micron precision. These high precision structures may be applied in a wide variety of fields (micromechanics, sensors, actuators, medical equipment, etc.). The wavelengths of the radiation used in the lithographic process must be carefully adapted to the thickness of the resist, and are in the 2-5 Å range for 300-500 μm phototresists. The synchrotron radiation facility being built at Campinas (LNLS) present a critical wavelength of 10 Å for dipole magnet radiation (nominal energy 1.15 GeV, magnetic field 1.4 T), in consequence the flux at shorter wavelengths, as required for LIGA experiments, may be insufficient. In order to evaluate the viability of such experiments in the LNLS, simulations of the energy deposition in thick-resist (100-500 μm) X-ray lithography were performed. The results indicate that reasonable exposure periods may be attained, providing that an insertion device is used to increase the flux in the region of hard X-rays (wiggler, 10 poles, magnetic field 1.9 T). Further studies about the implantation of the LIGA technique in the LNLS are under progress.

CRYSTAL STRUCTURE OF DINUCLEAR COPPER (II) COMPLEXES OF HEXADENTATE, N₆, SCHIFF-BASE LIGANDS, (N₆: 1,3 -BIS- (DI (2-PYRIDIL) METHYLIMINO)M-XYLENE)

GONZÁLEZ, O.

Universidad de la República - Uruguay

BAGGIO, R.

Comisión de Energía Atómica - Argentina

GARCÍA, A. M.; MANZUR, J.; GARLAND, M. T.;

SPODINE, E.; GONZÁLEZ, Y.

Universidad de Chile - Chile

In this report we describe the synthesis of hydroxo and methoxo - bridged dinuclear copper (II) complexes of 1,3 -bis- (di (2 - pyridyl) metyl imino) m-xylene by a synthetic procedure in which copper (I) complexes are oxidated in situ by reaction with molecular oxygen in dichloro-methane and methanol solution. The oxidation product in methanol is [Cu₂(N)₆(OCH₃)₂ClO₄] ClO₄ (1), and in dichloro-methane [Cu₂(N)₆(OH)₂ClO₄] ClO₄ (2). Complex (

1) is monoclinic, $P2_1/n$; complex (2) is orthorhombic, $P2_12_12_1$. Both complexes have similar coordination geometry: two metal centers linked by two oxygen atoms belonging to two methoxy or hydroxy ligand. Each copper atom is six coordinated and the principal distortion from the octahedral geometry arises from the deviation of the apical atoms from the basal plane. In both complexes the second perchlorate acts as counter ion and is linked to the organic ligand by hydrogen bonds. The copper-copper distance is 2.938(2) Å for (1) and 2.884(5) Å for (2).

ESTUDO ESTRUTURAL DOS COMPLEXOS ORGANOMETÁLICOS

$P(C_2H_5)_3MCl_2(NSC_7H_4)SCH_3$ ($M = Pt$ ou Pd)
GUIMARÃES, B. G.; SPEZIALI, N. L.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

SOUZA, G. F.

Departamento de Química, Fundação Universidade de Brasília

Informações estruturais dos compostos $P(C_2H_5)_3MCl_2(NSC_7H_4)SCH_3$, onde $M = Pt$ ou Pd , foram obtidas através de difração de raios-X em monocristais. Observamos, como esperado, que a substituição da Pt pelo Pd (ou vice-versa) não altera significativamente o arranjo cristalino dos compostos, ambos apresentando simetria ortorrômbica e parâmetros de rede muito semelhantes. Observamos ainda que o metal (Pt ou Pd) liga-se ao grupo (NSC_7H_4) através do átomo de nitrogênio, estando os dois átomos de cloro em posição *trans*. Esperávamos inicialmente que o metal se ligasse ao enxofre do grupo SMe e que os átomos de cloro estivessem em posição *cis*.

Valores elevados para as componentes dos tensores de deslocamento (U_{ij}) dos átomos de carbono dos grupos etila são forte indício de um desordenamento da estrutura. Tal desordem pode dever-se à liberdade de movimentação destes átomos em torno das ligações P-C e C-C. Conclusões definitivas a respeito de uma possível desordem térmica devem ser obtidas através de medidas a baixas temperaturas.

CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF A NEW SESTERTERPENE, A NATURAL PRODUCT ISOLATED FROM SIMABA CUNEATA.

CASTELLANO, E. E.; ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Plants from the family of Simaroubacea have compounds with a variety of pharmacological properties, including anticancerigen activity. Some of these compounds are also interesting because they can be used as taxonomic markers, to aid in the botanic classification of vegetables of the Rutabae order. The compound

reported in this work was extracted from Simaba Cuneata (E. Rodrigues Fho. and J.B. Fernandes), a plant belonging to that family. Crystal structure determination showed the compound to be a sesterterpen, which are rare natural products of structural complexity relatively high. This type of compound had never been reported before in plants of the Sumaroubacea family and has also the peculiarity of showing a new sesterterpen carbonic skeleton. The compound crystallizes in the monoclinic space group $P2_1$ with two slightly different conformation moieties and, as it often happens in these cases, it could not be solved by automatic standard direct methods and special handling of the data had to be used. Crystal data: $C_{29}H_{44}O_7$ crystallizes in space group $P2_1$, with $a=13.9217(6)$, $b=13.096(1)$, $c=15.9459(7)$ Å, $\beta=99.678(4)^\circ$, $Z=4$, $D_x=1.168$ gcm⁻³, $\mu(MoK\alpha)=0.767$ mm⁻¹. The structure was refined to $R=0.037$ for 3442 reflections and 683 parameters. The NMR high field spectrum was fully interpreted in terms of the molecular structure. This work has received partial support from FAPESP, CNPq and FINEP.

CRYSTAL STRUCTURE OF A NEW COMPLEX OF CADMIUM(II) AND VITAMIN B₁

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.; CASTELLANO, E. E.

Instituto de Física e Química de São Carlos

CASAS, J. S.; COUCE, M. D.; SANCHEZ, A.; SORDO, J.; VARELA, J. M.

Universidade de Santiago de Compostela. Spain.

The metal-ion interaction of vitamin B₁ is extremely interesting because the catalytic action of its pyrophosphate ester requires the presence of a bivalent metal ion. The Cd/thiamine complex reported here is a "true" Cd complex (where direct metal-T bonds are present) showing that thiamine, despite its reluctance to form direct bonds with the metal ions, is a versatile ligand. Crystal data: $C_{12}CdCl_3H_{19}N_4O_2S$ crystallizes in space group $P2_1/c$, with $a=6.999(2)$, $b=12.811(3)$, $c=20.587(4)$ Å, $\beta=91.88(2)^\circ$, $Z=4$, $D_x=1.808$ gcm⁻³, $\mu(MoK\alpha)=15.00$ mm⁻¹. The structure was refined to $R=0.036$ for 1616 reflections and 209 parameters. The compound is a centrosymmetric dimer with thiamine N(1') and O(5 γ) bridging between the two Cd atoms. The metal five-coordination is completed by three chlorine atoms.

This work has received partial support from FAPESP, CNPq and FINEP.

ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR DE $C_{17}H_{18}O_3S$

LARIUCCI, C.

UFG.- Dep. Física

FERRI, P. H.

UFG.- Dep. Química Orgânica

Esta substância apresentou atividade anti-PAF (anti - Fator de Atuação Plaquetária) pronunciada, comparada as substâncias submetidas a triagem farmacológica e escolhida por ter alta atividade. No presente trabalho pretende-se resolver a estrutura, desta substância e verificar a relação estrutura x atividade. Os dados iniciais da estrutura, obtidos por difração de raios-x usando radiação monocromatizada $K\alpha$ do molibidênio, são: $a=6,152(1)\text{Å}$, $b=16,719(1)\text{Å}$, $c=15155(1)\text{Å}$, $\beta=95.18(2)^\circ$, $Z=4$, $V=1552,5(5)\text{Å}^3$, sistema cristalino monoclinico, grupo espacial $P2_1/c$. 2724 reflexões únicas foram medidas, das quais 2014 com $I_c > 3\sigma(I)$. A resolução da estrutura foi obtida por métodos diretos e o refinamento parcial apresenta $R = 0,082$.

Apoio. UFG, IFQSC.

STATUS ATUAL DA ESTAÇÃO DE ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS (SAXS) PARA RADIAÇÃO SÍNCROTRON

BERNARDES, L. A.; TOLENTINO, H. C. N.;
RODRIGUES, A. R.

LNLS/CNPq, Campinas, SP, Brasil

TORRIANI, I. L.; CASTRO, A. R. B. DE
Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP,
Campinas, SP, Brasil

CRAIEVICH, A. F.

LNLS/CNPq, Campinas, SP e IFUSP, São Paulo, SP,
Brasil

RAMOS, A. Y.

IFGW, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil e
LMCP-CNRS, Paris, França

Serão relatados os progressos na construção da estação experimental de SAXS projetada para o anel síncrotron de 1.15 GeV do LNLS. Durante o último ano foram concluídos alguns dos componentes que formam parte da estação experimental. Entre eles as fendas de entrada e anti-parasíticas (guard-slits) e o caminho de vácuo segmentado com suas respectivas janelas e flanges para conexão do tipo KF. Da mesma forma o banco óptico, capaz de mover todo o caminho de vácuo em torno do eixo de rotação do monocromador por meio de um sistema de colchão de ar, foi totalmente concluído e testado. A óptica focalizante da estação foi reformulada em termos de suas distâncias características para permitir a utilização de uma fonte wiggler usando uma configuração na qual será possível a utilização desse elemento de inserção como fonte por duas estações ex-

perimentais (EXAFS e SAXS). Serão apresentados resultados de novos cálculos da óptica da linha e uma estimativa final das possibilidades experimentais desta instrumentação. Também serão mostrados os resultados de caracterização da linha de luz com fonte convencional. Fapesp, CNPq, RHAE-CNPq.

ESTUDO ESTRUTURAL DA NANOFASE CRISTALINA Fe(Si) NA LIGA Fe-Cu-Nb-Si-B USANDO O MÉTODO DE RIETVELD.

GRANADO, E.; SANTOS, D. R.; TORRIANI, I. L.
IFGW, UNICAMP

RAMOS, A. Y.

IFGW, UNICAMP e LMCP-CNRS

Na liga amorfa $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$, tratamentos térmicos determinados produzem a formação de nanocristais Fe-Si, responsáveis pelas excelentes propriedades magnéticas do material. A estrutura da fase nanocristalina formada depende da composição inicial da liga amorfa^a. Para ligas com conteúdo de silício menor do que 12% at. a estrutura observada por difração de raios-x é BCC ($Im\bar{3}m$), como a estrutura do α -Fe puro. Nesse caso, os átomos de silício estão estatisticamente distribuídos em substituição aos átomos de ferro na rede cristalina. Para mais de 12% at. de silício observa-se no espectro de difração o aparecimento de reflexões adicionais que correspondem a uma simetria FCC ($Fm\bar{3}m$), compatível com a formação da fase Fe_3Si , de estrutura DO_3 . As intensidades relativas, no entanto, são ligeiramente diferentes das esperadas. Considerando que não existem orientações cristalográficas preferenciais nas fitas nanocristalinas (fato reportado por vários autores^{a,bb}) esta diferença pode ser atribuída a desvios da estequiometria. Neste trabalho utilizamos o Método de Rietveld para refinar os parâmetros da estrutura observada e determinar a estequiometria que permita reproduzir as intensidades relativas observadas. CNPq, RHAE-CNPq.

^aM. Müller, N. Mattern, L. Ilgen - Z. Metallkunde Bd. 82, 895 (1991).

^bH. R. Hilzinger, Materials Science Forum, 62-64, 515 (1990).

ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXO ÂNGULO EM ESCALA ABSOLUTA DE INTENSIDADE

KELLERMANN, G.; CRAIEVICH, A. F.

LNLS e USP

Apresenta-se o projeto e fundamentos da construção de componentes de um arranjo instrumental que permite realizar medições de intensidade de espalhamento de raios-x a baixo ângulo em escala absoluta. O sistema se utiliza de um detector PSPC (Position-Sensitive Proportional Counter) e um sistema de colimação Kratky. As medidas serão feitas com uma fonte de raios-x conven-

cional, sendo que o feixe (linha) percorre uma câmara evacuada entre a amostra a ser medida o PSPC. A determinação da intensidade do feixe direto é feita utilizando-se o método da fenda móvel. Neste método uma fenda ($35 \mu\text{m}$) se move com velocidade linear constante (25 mm/s) ao longo da seção do feixe linha, na direção perpendicular ao mesmo. A parte do feixe que atravessa a fenda móvel encontrará uma segunda fenda fixa ($50 \mu\text{m}$) posicionada imediatamente diante do detector. Isto permitirá que a taxa de fótons que atinge o detector seja suficientemente baixa para ser medida diretamente sem atenuação. O posicionamento do "beamstopper", filtros e fendas na câmara evacuada será feita desde o exterior através de dispositivo pneumático, proporcionando confiabilidade e facilidade de operação. O sistema permitirá: i) a medição precisa da atenuação da amostra, ii) a determinação da função de intensidade de espalhamento em escala absoluta e iii) a medição do perfil vertical do feixe direto, necessários para o procedimento matemático de "desmearing" dos resultados.

**CRISTALIZAÇÃO E DADOS
CRISTALOGRAFICOS DE UMA
FOSFOLIPASE A_2 - K49 (BTHtx-I)
EXTRAÍDA DO VENENO DA "BOTHROPS
JARARACUSSU"**

GIOTTO, M. T. S.; AZEVEDO, W. F.; HONJALES, E.; OLIVA, G.; GARRATT, R.; MASCARENHAS, Y. P.
Instituto de Física e Química de São Carlos, USP.

CINTRA, A. C. O.; GIGLIO, R.

*Departamento de Bioquímica, Faculdade de Farmácia de
Ribeirão Preto, 14049, Ribeirão Preto, USP.*

ARAÚJO, H. S. S. DE

D.C.S., UFSCar, 13565-905, São Carlos, SP.

BTHtx-I é uma fosfolipase A_2 -Lis 49 composta de uma única cadeia polipeptídica de 121 aminoácidos e peso molecular 14.000. A principal característica das fosfolipases A_2 -Lis 49 é a ausência de atividade catalítica devido a substituição do Asp 49 pela Lis 49 no sítio de ligação do Cálcio. Embora desprovida de atividade fosfolipídica, a BTHtx-I revela um alto grau de homologia com as fosfolipases A_2 -Asp 49 e outras miotoxinas Lis 49. A resolução da estrutura desta enzima ajudaria a compreender a alteração de função causada por esta variação estrutural. Cristais desta enzima foram obtidos usando a técnica de difusão de vapor ("hanging drops").

Gotas de $10 \mu\text{l}$ foram formadas misturando-se $5 \mu\text{l}$ de solução de proteína em água milliQ numa concentração de 10 mg/ml mais $5 \mu\text{l}$ da solução do reservatório e como solução precipitante foi usado 0.1 M Hepes em $\text{pH}=7.0$ mais sulfato de amônia a diferentes concentrações que variaram de 59% a 62%. Um monocristal tabular com faces aparentemente hexagonais e diâmetro de 0.2 mm foi usado para coleta de dados a 2.5 \AA de resolução no sistema R-AXIS II. Os dados foram processados usando o "Software" do R-AXISII. Os parâmetros obtidos foram $a=b=57.55(5) \text{ \AA}$, $c=130,77(5) \text{ \AA}$, sistema trigonal com os seguintes grupos espaciais possíveis: $P321$, $P3_121$ e $P3_221$ de acordo com os resultados obtidos pelo cálculo da função de auto-rotação usando AMoRe ("Automated Molecular Replacement Package", J. Navaza). Agradecimentos: FAPESP, CNPq e FINEP.

**ANÁLISE GENERALIZADA DO
DIFRATÔMETRO DE DOIS EIXOS**

CARVALHO, C. A. M.

Instituto de Física, USP, São Paulo, SP

A análise quantitativa dos perfis de intensidade obtidos com um difratômetro de cristal duplo é quase sempre baseada no desenvolvimento apresentado por Compton & Allison¹. Esse tratamento faz várias hipóteses: a) os perfis de difração intrínsecos dos dois cristais têm uma largura da ordem de segundos de arco; b) os planos de difração dos dois cristais são paralelos ao eixo de rotação. Além disso, esses autores só consideram em detalhe, no arranjo paralelo, o caso em que as distâncias interplanares dos dois cristais são exatamente iguais. Neste trabalho estudamos a influência do desalinhamento dos planos de difração e de diferenças de distância interplanar entre os cristais. Estabelecemos relações entre esses desvios da situação ideal com a divergência do feixe incidente e a largura dos perfis intrínsecos, que permitem otimizar as condições experimentais. Consideramos também os casos de perfis largos, como os produzidos por super-redes distorcidas ou finas, e medidas em regiões distantes do centro dos perfis de difração, como as empregadas em estudos de espalhamento difuso.

¹Compton, A. H. & Allison, S. K. (1935): "X-Rays in Theory and Experiment", Van Nostrand.

FÍSICA ESTATÍSTICA E FENÔMENOS CRÍTICOS

Workshop: Sistemas Complexos I
 (EST, MMM, SUC) – 08/06/94

Rugosidade e Dimensão Fractal de Perfis Auto-afins

MOREIRA, J. G.

Departamento de Física - ICEx - UFMG

Auto-afinidade aparece em perfis fractais que apresentam fatores de escala dependentes da direção. Para esses perfis é válida a relação de escala $w \sim L^\alpha$, sendo w a rugosidade (dispersão) do perfil, L seu tamanho linear e α o denominado expoente da rugosidade. Em d -dimensões, a dimensão fractal D dessa estrutura é dada pela relação $D = d - \alpha$. Tal resultado pode ser obtido a partir da construção de recobrimentos do perfil auto-afim, baseadas no conceito de rugosidade local.

Dois algoritmos, um baseado na rugosidade em torno da média e outro na rugosidade em torno da melhor reta, são utilizados no cálculo de D em funções teste com $d = 2$ e dimensão fractal conhecida. Comparando com outros algoritmos, os resultados obtidos com os algoritmos propostos são muito bons.

Discutimos aplicações desses algoritmos para o estudo de modelos de crescimento de estruturas compactas com perfis auto-afins e para o estudo de fraturas bidimensionais.

Learning from examples in neural networks

FONTANARI, J. F.

Instituto de Física e Química de São Carlos-USP

The problem of learning from examples in discrete-weights, single-layer feedforward neural networks is investigated within the statistical mechanics framework of Gardner. In particular a new technique, termed micro-canonical method, is introduced which makes it possible to obtain non-trivial rigorous lower bounds for the minimal training error when employed in conjunction with the annealed approximation. Moreover, when employed together with the replica symmetric ansatz this method yields the exact solution for models possessing frozen phases at nonzero temperatures. As an application of the micro-canonical method, the effects of discretization of weights on the learning capabilities of neural networks are studied. A by-product of this analysis is the derivation of an upper bound for the content of information of a linearly separable mapping. Model selection criteria as the Minimal Length Description and the Occam's razor are also critically examined within this framework.

Work done in collaboration with R. Meir, Technion, Israel.

MODELOS ESTATÍSTICOS PARA SISTEMAS APRESENTANDO ORDENS ESPACIALMENTE MODULADAS

YOKOI, C. S. O.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Estruturas espacialmente moduladas foram observadas em uma variedade muito grande de sistemas da matéria condensada. A modulação pode surgir nas posições dos átomos ou em certas propriedades locais, como magnetização, polarização elétrica, composição química, etc. O período da modulação pode ser comensurável ou incomensurável com o período da rede subjacente, e pode variar de uma forma intrincada como função de parâmetros como temperatura, pressão ou campo magnético aplicado. Como consequência o gráfico do número de onda pode apresentar um comportamento fractal descrito como "escada do diabo", e o diagrama de fases pode ser extremamente complexo, consistindo de uma infinidade de fases moduladas distintas. Inicialmente apresentaremos a teoria sobre ordenamentos modulados baseada num modelo prototípico denominado de Frenkel-Kontorova. Do ponto de vista físico a

transição entre diferentes fases moduladas pode ser descrita em termos de criação e interação de paredes, também denominadas defeitos, "kinks" ou "sólitons". A natureza da transição, que pode ser comensurável-incomensurável ou comensurável-comensurável, depende fundamentalmente do tipo de interação entre as paredes. Iremos também descrever uma técnica especialmente desenvolvida para resolver esse tipo de modelos, conhecida como o "método dos potenciais efetivos" [R. B. Griffiths e W. Chou, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1929 (1986)]. Finalmente, apresentaremos diversos modelos estatísticos que ilustram e confirmam vários aspectos da teoria apresentada.

PARALLEL SIMULATION OF BOOLEAN NETWORKS

OLIVEIRA, P. M. C. DE

Instituto de Física, UFF, Cx. Postal 100296, Niterói, RJ

It is now a well known fact that complex behavior can arise from the dynamic evolution of systems composed of many interconnected simple units. The prototype example is the very complex behavior observed in the set of neurons in a human brain, where the functioning of each neuron is very simple: depending whether the sum of electric impulses received from other neurons surpasses or not a certain threshold, it sends or not an electric impulse to others. In this example the current state of each neuron can be modeled by a binary variable whose values are 1 (firing neuron) or 0 (quiet neuron). Many other systems of interest in various distinct research fields (population dynamics, magnetic systems, critical phenomena, genetic evolution, mathematical games, economic networks, chemical reactions, social behavior, seismology, etc.) can also be modelled by networks of such simple binary units. These values 1 and 0 can be associated to the logical values *true* and *false*, respectively, allowing one to model the system dynamic evolution using the traditional Boolean logical operators AND, OR, XOR, NOT, etc. The future state of a given unit in the network is determined from the current states of the other units linked to it, by applying a certain sequence of Boolean operations. The time is considered as flowing in discrete steps. In most cases, the rule (particular sequence of Boolean operations to be performed) for each unit is the same for all units, or one can have a few number of rules, each one common to a large set of units. In these cases, the same sequence of operations can be performed in parallel for a whole set of units, increasing substantially the updating speed. Coincidentally, digital computers work using the same Boolean operations, and the same strategy. A 16-bit word personal computer, for instance, stores data in packets of 16 Boolean values 1 or 0, each one called a *bit*. Each packet is called a *word* and is able to code 65536 distinct informations. The Boolean operations are performed in parallel by the computer, i.e. the 16 bits of the result are calculated simultaneously. This parallel operation feature of ordinary computers can be explored by carefully expressing the dynamic rule through Boolean operators, allowing one to follow the dynamic evolution of virtually any Boolean network (BN) in a very fast way. The author and collaborators studied some BN models in the last few years, including Monte Carlo simulations of magnetic systems, neural networks, cellular automata, evolutionary models and optimization problems. A tutorial review of the computational strategy as well as a brief discussion of some problems and models where it is applied is available [1].

REFERENCE

[1] de Oliveira P.M.C., *Computing Boolean Statistical Models* World Scientific, Singapore, ISBN 981-02-0238-5 (1991)

*Sistemas Complexos II (EST) –
08/06/94*

TRANSIÇÃO LISA RUGOSA NUM SISTEMA COMPLEXO

LUCENA, L. DOS S.; SILVA, L. R. DA

Departamento de Física da UFRN, Natal RN 59072-970

ROUX, S.

LPMMH, ESPCI, Paris, França

Recentemente investigamos o comportamento crítico de

um sistema complexo no qual ocorre o crescimento de polímeros lineares e ramificados num meio com desordem¹. No modelo adotado a competição entre os vários ingredientes estocásticos e efeitos de memória gera uma fenomenologia bastante rica e não trivial. Em particular verificamos a existência de uma transição de fase cinética entre uma fase de crescimento limitado onde os polímeros morrem devido a efeitos de volume excluído e bloqueios por impurezas inertes, e outra fase em que sucessivas bifurcações multiplicam o número de pontas, superando a ação dos obstáculos e consequentemente acarretando um crescimento infinito. A

fronteira entre as duas regiões é função da probabilidade de ramificação b e da concentração de impurezas c . Neste trabalho apresentamos fortes evidências de outra transição de fase cinética, dentro da região de crescimento infinito, separando um regime no qual as frentes de crescimento são lisas, de outro regime em que estas superfícies são rugosas. A fase lisa apresenta aglomerados com fronteiras planas (facetadas), semelhantes a processos de cristalização, e corresponde a elevados valores de b e pequenos valores de c . Usando simulações em computador e também cálculos analíticos, determinamos a linha crítica dessa transição para alguns tipos de redes. O fenômeno é relacionado com a percolação direcionada e tem para o caso de $b = 1$ um valor crítico para c igual a $c^* = 1 - P_c^{dir}$, onde P_c^{dir} representa o limiar da percolação direcionada. Analisamos ainda o problema com base nos diagramas de velocidade de crescimento dos sítios ativos e discutimos a possibilidade de existência de anisotropias. ¹ L.S. Lucena et

al., *Phys. Rev. Letters*, **72**, 230 (1994)

APRENDIZADO E RECUPERAÇÃO EM REDES NEURAIS ATRATORAS COM RUIÍDO ACIMA DA SATURAÇÃO

ERICHSEN JR, R.

Univ. Católica de Leuven, Bélgica

THEUMANN, W. K.

UFRGS

O aprendizado em redes neurais ótimas acima da capacidade crítica de armazenamento foi estudado por varios grupos com diversos algoritmos de aprendizado. Para que os padrões sejam pontos fixos da dinâmica é necessário ter parâmetros de estabilidade maiores que um determinado mínimo. Em este trabalho estudamos a distribuição de estabilidades em redes treinadas com ruído (temperatura) mediante os algoritmos de Gardner-Derrida, do Perceptron e do Adatron, utilizando uma generalização do formalismo de Gardner-Derrida. Mostra-se que desaparece o máximo em forma de δ que existe nas redes sem ruído ficando uma distribuição simétrica ou assimétrica segundo o algoritmo de aprendizado. Aham-se as frações de erros correspondentes que são sempre não nulas em caso de ruído implicando que não existe uma capacidade crítica de armazenamento a temperatura diferente de zero. Mostra-se a dependência explícita com o ruído da fração de erros que cresce com o ruído. Estuda-se a dinâmica de redes diluídas para as quais o primeiro passo da dinâmica fornece a relação exata entre os "overlaps". Aham-se as bacias de atração no plano α contra κ , onde α é a capacidade de armazenamento e κ é o limite inferior da estabilidade. Os diagramas apresentam regiões de recuperação total ou parcial que são fortemente reduzidas pelo ruído.

TOLERANCE TO HORMONES AND RECEPTORS IN A IDIOTYPIC NETWORK MODEL

WEISBUCH, G.

École Normale Supérieure

SANTOS, R. M. Z. DOS

Universidade Federal Fluminense

NEUMANN, A.

Weizmann Institute of Sciences

Using a simple mathematical model of the Jerne network for the immune system, we investigate the conditions of the antigen presentation that results in tolerance to pairs of antigens with complementary shapes, such as hormones and receptors. We might expect that some clone populations that recognize the hormone also recognize the clones that recognize the receptor, since their shape are complementary. This study is motivated by the prevalence of the auto-immune diseases involving hormones and neurotransmitters and their respective receptors as self-antigens. We have considered the following cases: when only one antigen is presented during the first immunization and when both antigens are presented simultaneously. The model shows that, in order to ensure full tolerance to coupled antigens in those conditions that ensure tolerance to isolated antigens, both antigens have to be presented simultaneously in similar conditions. This result suggests a possibility for preventing some auto-immune diseases.

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO COM RÉPLICAS NO ESPAÇO REAL PARA VIDRO-DE-SPINS

ALMEIDA, J. R. L. DE; COUTINHO, S.

Universidade Federal de Pernambuco, Recife.

Propomos uma ampliação do método do Grupo de Renormalização no espaço real para vidro-de-spins em redes hipercúbicas no contexto da aproximação de Migdal-Kadanoff para tratar sistemas com réplicas. Neste esquema a solução réplica simétrica reproduz apenas os resultados consistentes com métodos de decimação simples usuais. A natureza complexa dos vidros-de-spins requer o uso de um grupo de renormalização não-linear em sua análise [1]. A introdução de quebra de simetria de réplicas na aproximação de Migdal-Kadanoff, inserindo de maneira natural um esquema grupo de renormalização não-linear para o problema, é discutida e analisada.

[1] J. R. L. de Almeida, *J. Phys. A* **26**, 193, (1993); S. Coutinho, J. R. L. de Almeida e E. M. F. Curado, *Proc. of the IFIP International Working Conference on Fractals in the Natural and Applied Sciences - FRACTAL 93*, ed. M. M. Novak, (Elsevier, 1994).

Modelo Desordenado com Dinâmica Intermediária

CATICHA, N.
USP

Um modelo de spins com desordem é examinado. A desordem não é necessariamente temperada nem recozida, mas pode evoluir em uma escala de tempo intermediária. Os casos temperados e recozidos, obtidos nos casos limites, são respectivamente o modelo de Ashkin-Teller de P cores e a rede neural de Hopfield (P padrões). Os modelos de dinâmica intermediária se comportam como a memória associativa de Hopfield em escala de tempos curtas e assintoticamente como o modelo de Ashkin-Teller. A evolução temporal dos parâmetros de ordem são obtidos a partir de equações mestras na aproximação de campo médio. Este tipo de sistema serve para modelar o processo de deterioração de memórias por envelhecimento de sinápses ou, em outras condições, para estudar a formação de categorias.

FASE CAÓTICA NO AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY-KINZEL: ANÁLISE DE CAMPO MÉDIO

TOMÉ, T.
USP

O autômato celular de Domany-Kinzel exibe uma fase ativa e uma fase absorvente de vácuo. O sistema é intrinsecamente irreversível dado que se evoluir para o estado absorvente não pode mais escapar dele. Recentemente [1], foi descoberto, através de simulações numéricas, que a fase ativa pode exibir comportamento caótico. Propomos uma formulação analítica do problema e, através de aproximações de campo médio dinâmicas, estudamos o comportamento da fase caótica e das transições de fase dinâmicas do modelo.

[1] M. L. Martins, H. F. Verona de Rezende, C. Tsallis and A. C. N. Magalhães, *Phys. Rev. Let.* **66**, 2045 (1991).

Fenômenos Críticos em Sistemas Desordenados e Polímeros (EST) - 08/06/94

ESTUDO ESTATÍSTICO DA CONFORMAÇÃO DE POLÍMEROS ADSORVIDOS

IZZO, D.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O problema de adsorção de polímeros em solução diluída na presença de uma parede atrativa tem sido intensamente estudado. No caso de extremidades livres, temos a solução de campo-médio proposta por Jones; há também uma forma de escala proposta por de Gennes (confirmada experimentalmente) e, mais tarde, Daoud apresentou um estudo teórico completo revendo todos os regimes possíveis. No caso de uma extremidade fixa à parede, temos vários cálculos perturbativos e simulações Monte Carlo propostas por Kremer e outros. Entretanto os resultados numéricos existentes não fornecem informações satisfatórias quanto aos comprimentos quadráticos médios de um polímero em solução, variâncias, distribuições de "loops", etc. Isso é devido às limitações computacionais que aparecem com o aumento das cadeias. Nosso trabalho numérico foi capaz de explorar o regime assintótico de cadeias longas: obtivemos valores para várias das grandezas mencionadas acima. Isso foi possível ao notarmos que o problema computacional reduzida-se consideravelmente ao simularmos a conformação do polímero sobre uma estrutura auto-similar como foi sugerida na formulação de escala de de Gennes.

APLICAÇÃO DOS APROXIMANTES DIFERENCIAIS PARCIAIS NA TRANSIÇÃO DE COLAPSO EM POLÍMEROS RAMIFICADOS

ONODY, R. N.; NEVES, U. P. DA C.
IFQSC-USP-São Carlos

Proposto em 1977 por M. Fisher, o método dos aproximantes diferenciais parciais não tem tido muito sucesso na descrição de fenômenos multicríticos. Formulado para analisar séries com duas ou mais variáveis, a técnica é uma extensão dos aproximantes de Padé e permite a determinação de pontos de transição de fase multicríticos e seus respectivos expoentes críticos. Aplicamos o método no estudo da transição de colapso em polímeros ramificados em redes quadradas. Essa transição tem sido bastante estudada através do método de Monte Carlo, matriz de transferência, etc. Em particular, modelar esse sistema como animais na rede tem dado bons resultados. Os animais incorporam de maneira natural a interação repulsiva de volume excluído e a interação atrativa de monômeros primeiros vizinhos. Graças à uma enumeração exaustiva desses animais pudemos obter a função geratriz como uma expansão em série nas variáveis peso de Boltzmann e fugacidade. A partir dessa função geratriz derivamos a densidade desse sistema. Ela indica a existência de uma junção de uma linha de transição de fase de 1ª ordem com outra de 2ª ordem, isto é, a existência de um ponto tricrítico. Analisamos, por intermédio dos aproximantes diferenciais parciais, a série correspondente à compressibilidade isotérmica. Utilizamos o formato homogêneo e simétrico do método para, ao invés de

extrapolarmos os resultados para diferentes tamanhos dos aproximantes, calcularmos uma média a partir dos maiores aproximantes. Dessa maneira, determinamos a posição do ponto tricrítico com resultado bastante satisfatório e comparável aos obtidos por outras técnicas. Está em andamento a análise dos expoentes críticos e das curvas características associadas aos aproximantes.

O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO POR ESCALA DE TAMANHOS FINITOS APLICADO AO ANTIFERROMAGNETO DILUÍDO COM CAMPO E AO FERROMAGNETO EM CAMPO ALEATÓRIO

FIGUEIREDO NETO, J. M. DE; OLIVEIRA, S. M. DE;
OLIVEIRA, P. M. C. DE
UFF

Desde o trabalho de Fishman e Aharony em 1979 (J. Phys. C 12, L729) que o antiferromagneto diluído na presença de campo magnético uniforme é considerado como uma realização experimental do ferromagneto em campo aleatório. Contudo, alguns trabalhos [1] indicam que estes dois problemas podem não ser equivalentes em $D = 2$, que é a dimensão crítica inferior do problema do campo aleatório. Uma vez que a conjectura de Fishman e Aharony envolve argumentos de campo médio que costumam ser falhos na dimensão crítica inferior, é possível que a equivalência entre estes dois problemas de fato não seja válida em $D = 2$. Pretendemos utilizar o Grupo de Renormalização por Escala de Tamanhos Finitos para estudar e comparar estes dois problemas. Este Grupo de Renormalização tem como uma das vantagens sobre os outros grupos o fato de utilizar grandezas que comprovadamente se preservam por transformação de escala [2], e que tem como única aproximação o tamanho finito das redes utilizadas, pois o grupo se baseia unicamente na hipótese de escala de Fisher para tamanhos finitos. Ele foi utilizado com sucesso nos ferromagnetos [3], e agora foi adaptado para tratar também os antiferromagnetos.

1 S. Moss de Oliveira, M.A. Continentino and P.M.C. de Oliveira, *Physica A* 152, 477 (1988).

S.L.A. de Queiroz and R.R. dos Santos, *J. Phys. C* 21, 1995 (1988).

P.M.C. de Oliveira, S. Moss de Oliveira and S.L.A. de Queiroz, *Physica A* 175, 345 (1991).

2 P.M.C. de Oliveira, *Europhys. Lett.* 20, 621 (1992).

3 J. Monteiro de F. Neto, S. Moss de Oliveira and P.M.C. de Oliveira, *Physica A* (1994).

Modelo de seis vértices com desordem congelada

TAMASHIRO, M.; SALINAS, S.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Utilizando a técnica da matriz de transferência, obtemos expressões exatas para as funções termodinâmicas de um análogo unidimensional do modelo de seis vértices com elementos aleatórios. A desordem introduzida é de caráter *quenched* (congelado) e está associada às energias dos estados excitados, que são definidas por um conjunto de probabilidades independentes e identicamente distribuídas,

$$\rho(\epsilon_i) = p \delta(\epsilon_i - \epsilon) + (1 - p) \delta(\epsilon_i - r\epsilon),$$

para $i = 1, 2, \dots, N - 1, N$. Nesse modelo as energias das configurações excitadas para uma dada coluna i têm uma probabilidade p de assumir o valor $\epsilon > 0$ e uma probabilidade $(1 - p)$ de assumir o valor $r\epsilon > 0$. Constatamos que não há alterações qualitativas em relação ao caso puro¹, com a natureza da transição permanecendo de primeira ordem.

1 J. A. Plascak e S. R. A. Salinas, *Rev. Bras. Fís.* 10, 173 (1980).

DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO DILUÍDO.

REINEHR, E. E.; FIGUEIREDO, W.

Departamento de Física, UFSC

Através da técnica do grupo de renormalização de campo médio, determinamos o diagrama de fases do modelo de Ising antiferromagnético diluído, na presença de um campo magnético uniforme. Utilizamos blocos com um, dois e quatro spins. Quando não temos diluição, a transição é sempre de segunda ordem. Entretanto, quando começamos a diluir os sítios do sistema a transição contínua termina num determinado ponto do diagrama. A partir desse ponto, não é possível, com esse método, determinar novas soluções. Como esse ponto está no extremo de uma linha de transições contínuas, acreditamos que possa ser a indicação de um ponto tricrítico. Essa conjectura está baseada no fato de que um antiferromagneto diluído na presença de um campo magnético uniforme é equivalente a um modelo de Ising ferromagnético num campo aleatório.

Modelo Cúbico Discreto e um novo tipo de Percolação.

MAGALHÃES, A. C. N. DE
CBPF
MARIZ, A. M.
UFRN

Kasteleyn e Fortuin estabeleceram em 1969 uma correspondência entre as grandezas físicas do modelo de Potts (problema térmico) e as da percolação de ligações (problema geométrico probabilístico). Neste trabalho generalizamos, para um modelo cúbico discreto com N componentes, o procedimento por eles utilizados na geometrização do modelo de Potts. O referido modelo cúbico tem sido aplicado na descrição de transições de fase magnéticas e estruturais que ocorrem em alguns compostos cúbicos de terra rara. Além disso, contém como casos particulares vários modelos estatísticos importantes tais como os de Ising, Potts, $Z(4)$, "self-avoiding walk". Ao geometrizarmos o modelo cúbico discreto, verificamos que a energia livre e a função de correlação deste estão respectivamente relacionadas ao número médio de "clusters" e à conectividade entre pares num novo tipo de percolação de ligações onde certos tipos de "clusters" são proibidos. Nossos resultados reproduzem nos casos limites apropriados os resultados conhecidos na literatura.

DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE BLUME CAPEL COM UM CAMPO CRISTALINO ALEATÓRIO E UM CAMPO MAGNÉTICO

BORELLI, M. E. S.; CARNEIRO, C. E. I.
USP

O modelo de Blume-Capel com um campo cristalino aleatório Δ_i , na presença de um campo magnético H , é descrito pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} S_i S_j + \sum_i \Delta_i S_i^2 - H \sum_i S_i$$

onde $S_i = 0, \pm 1$, a primeira somatória é sobre primeiros vizinhos e os Δ_i são variáveis aleatórias independentes que obedecem a distribuição de probabilidades

$$\mathcal{P}(\Delta_i) = p\delta(\Delta_i - \Delta) + (1-p)\delta(\Delta_i)$$

Para $p = 1$ obtemos o modelo de Blume-Capel usual. Neste caso, quando $H = 0$, as fases paramagnética e ferromagnética são separadas por linhas de primeira e segunda ordem que se encontram em um ponto tricrítico. Na presença de um campo H aparecem duas "asas", que são superfícies de transições de primeira ordem, limitadas por linhas críticas que se unem no ponto tricrítico. A introdução de aleatoriedade muda drasticamente o diagrama de fases deste modelo. Aparecem três tipos

de diagramas dependendo do valor de p . Neste trabalho estudamos, na aproximação de campo médio, as superfícies de primeira ordem para $H \neq 0$ e $0 < p < 1$.

QUENCHED BOND DISORDERED POTTS MODEL ON DIAMOND-TYPE HIERARCHICAL LATTICES

BOECHAT, B.; MELLO, E. V. L. DE
UFF

An extensive study of the bond diluted q -state Potts model on a family of diamond-type hierarchical lattices was presented very recently ^a. The phase diagram showing new random critical behavior and tricritical point lines was obtained using the approximation of a fixed bimodal probability distribution. It is well known that such treatment is not appropriate to deal with quenched disorder, and in particular does not satisfy the Harris criterion ^b. Instead of fixing the distribution, we study this model by monitoring the effect of the renormalization group transformation on the bond probability distribution. In this case, all critical properties, including new random critical behaviors are determined from the fixed point probability distribution. We calculate the random critical fixed points and show that they satisfy the Harris criterion.

^aYou-Zhi Wu, Yung Qin and Z R Yang, Phys. Rev. B 48, 3171 (1993)

^bHeber R da Cruz and R B Stinchcombe, J. Phys. C 19, 3555 (1986)

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO E SIMULAÇÃO MONTE CARLO DE SISTEMAS ISING DILUÍDO

ARAÚJO FILHO, P. F. DE
Departamento de Física - UFPE

SOUSA, A. J. F. DE

Departamento de Física - UFPE e Departamento de Física e Matemática - UFRPE

MOREIRA, F. G. B.

Departamento de Física - UFPE

Recentemente [1] propomos um método de simulação numérica para estudar as propriedades críticas de sistemas de spin. Nesta comunicação aplicamos esse novo esquema MCRG para estudar o comportamento crítico do modelo de Ising diluído em três dimensões. Para gerar configurações no ensemble canônico empregamos a dinâmica de Wolff. A cada configuração de spin do sistema original, aplicamos uma transformação de grupo de renormalização que consiste em dividir a rede em blocos de tamanho $b = 2$ e atribuir a cada bloco uma variável de spin -1 ou $+1$, de acordo com a regra da maioria. Esta transformação de blocos é repetida até um tamanho de rede $L = 2$. Nossos resultados para a temperatura e os expoentes críticos foram obtidos de

simulações em redes cúbicas de até 10 milhões de sítios, com condições de contorno periódicas e concentrações de sítios magnéticos no intervalo $0.4 \leq p \leq 1$. Os efeitos da diluição nos expoentes críticos são discutidos tendo em mente o critério de Harris para sistemas desordenados, tendo o expoente do calor específico $\alpha > 0$ no caso sem diluição. Nossas simulações em redes bastante grandes e em um amplo intervalo de concentrações, contribuem na elucidação da importante questão da dependência ou não dos expoentes críticos com a diluição. [1] A. J. F. de Souza and F. G. Brady Moreira, *Europhys. Lett.* **17**, 491 (1992).

Polímero numa Rede Unidimensional

MARTINS, J. A.; STILCK, J. F.
UFSC

Consideramos um modelo para um polímero dirigido numa rede unidimensional de largura 2, com interações atrativas entre monômeros que ocupam sítios primeiros vizinhos na rede sem serem consecutivos ao longo da cadeia. Mostramos que este modelo pode ser mapeado no modelo de Ising unidimensional com interações de primeiros e segundos vizinhos. Analisamos o comportamento cinético do modelo na região do diagrama de fases em que o estado fundamental não apresenta frustração, a partir de uma hipótese do tipo Glauber para a evolução temporal das configurações do modelo. Para desacoplar as equações de evolução temporal do modelo, recorremos à aproximação de pares. Nesta aproximação mostramos que o valor do expoente crítico dinâmico apresenta uma dependência da razão das intensidades das interações entre spins segundos e primeiros vizinhos.

Diluição Correlacionada de Sítio-Ligação (SBC) para o Modelo D- Vetorial

ALBUQUERQUE, D. F. DE; SOUSA, J. R. DE;
FITTIPALDI, I. P.
UFPE

O método de grupo de renormalização de campo médio (MFRG)[1] é aqui aplicado para estudar o comportamento crítico do modelo com diluição correlacionada de sítio-ligação para o modelo D-vetorial. Recentemente, os autores da Ref.2 estudaram a universalidade para a declividade inicial e o diagrama de fase no SBC com diluição, para o modelo de Ising no sistema magnético aleatoriamente diluído $KNi_pMg_{1-p}F_3$ como também ao sistema isoestrutural $KMn_pMg_{1-p}F_3$. A abordagem é baseada em dois modelos (A ou B) para as interações, onde a ocupação dos sítios vizinhos-mais-próximos são medidos por meio de um parâmetro de correlação. Os diagramas de fase para $Z=6$ são analisados e a linhas críticas ferro-paramagnética e vidro de spin-paramagnética são obtidas explicitamente para

qualquer número de coordenação Z , para alguns valores do parâmetro de correlação. Os casos em que $D=1, 3$ e ∞ são estudados, e a declividade quando $p = p_c$ apresenta comportamentos distintos em cada situação. Por outro lado, a declividade $\Delta(\alpha)$, em $p=1$, é obtida e verificamos que a relação $\Delta(\pm 1)/\Delta(0)$ depende do modelo em questão (A ou B) e não depende da dimensionalidade do spin D .

- [1] J. O. Indekeu, A. Maritan and A. L. Stella, *J. Phys. C15*, L291 (1992).
[2] D. F. de Albuquerque and J. R. de Sousa, *Phys. Lett. A14*, 421 (1992), *ibid. Phys. Rev. B48*, 16484 (1993).

Propriedades Termodinâmicas no Modelo de Ising com Diluição Correlacionada de Sítio-Ligação (SBC)

ALBUQUERQUE, D. F. DE; SOUSA, J. R. DE;
FITTIPALDI, I. P.
UFPE

O modelo de diluição correlacionada de sítio-ligação, foi recentemente estudada pelos autores da Ref.1 abordando os compostos $KNi_pMg_{1-p}F_3$ e $KMn_pMg_{1-p}F_3$, onde especial atenção prestou-se ao diagrama de fase no plano T-p e a relação de recorrência obtida para a declividade inicial quando $p=1$. O presente trabalho pretende estudar, agora, as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising quando tomamos a diluição ao modelo SBC, desta feita fazendo aplicação do método variacional para a energia livre[2]. Sendo assim, propriedades tais como magnetização, susceptibilidade, energia interna e calor específico, são abordadas. O comportamento destas grandezas serão analisadas mediante a variação do parâmetro de correlação dentre dos limites entre zero e a unidade, nos respectivos diagramas de fase. Em particular, atenç ao especial é dada a relação de recorrência obtida recentemente na Ref.1 usando o método de grupo de renormalização de campo médio.

- [1] D. F. de Albuquerque and J. R. de Sousa, *Phys. Lett. A14*, 421 (1992), *ibid. Phys. Rev. B48*, 16484 (1993).
[2] L. G. Ferreira, S. R. Salinas and M. J. de Oliveira, *Phys. St. Sol.(b)83*, 229 (1977).

RANDOMLY DECORATED ISING MODEL ON THE SQUARE LATTICE †

COSTA, M. A.
UFPI
GONÇALVES, L. L.
UFCE

The 2D Ising model decorated with spins of magnitudes $s=1$ and $1/2$ is considered. The bonds are decorated with n spins so that the energy associated to the bond

ij is given by[1]:

$$H_{ij} = -J\sigma_i\sigma_j - t_{ij} \sum_{\ell=1}^n J\tau_{\ell}(\sigma_i + \sigma_j) - t_{ij} \sum_{\ell=1}^n J'\tau_{\ell+1},$$

where $\sigma = \pm 1$, $\tau = \pm 1/2$ and $\pm 1, 0$, $t_{ij} = 0, 1$ is the random variable with an annealed distribution, and $\tau_{n+1} = \tau_1$. The model is exactly solved by mapping it onto an effective 2D Ising model. The phase diagram is determined and a discussion is presented for $n \rightarrow \infty$.

[1] R. J. V. dos Santos, F. C. Sá Barreto and S. Coutinho, J. Phys. A23, 2563(1990)

† Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq and Finep.

MIXED SPINS ISING MODEL IN ANNEALED RANDOM FIELDS†

PEREIRA, C. A.; GONÇALVES, L. L.
UFCE

The ferromagnetic Ising model with spins of magnitudes $1/2$ and 1 on the honeycomb lattice is considered. Each set of spins occupies one of the two equivalent sublattices, and the random field is generated by using the procedure developed by Gonçalves and Horiguchi[1]. The phase diagram is obtained exactly for symmetric field distributions by mapping the system onto the spin $1/2$ Ising model on the triangular lattice. Explicit results are presented for the discrete case field distribution $P(h') = c\delta(h') + (1/2 - c)(\delta(h' - h) + \delta(h' + h))$. The constrained and unconstrained cases[1] are considered and the effect of the uniaxial anisotropy is also discussed.

[1] L. L. Gonçalves and T. Horiguchi, Int. J. Mod. Phys. B4, 1693(1990)

† Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq, Finep and FADEP.

SPINS SYSTEMS IN STRONGLY CORRELATED RANDOM FIELDS†

GONÇALVES, L. L.
UFCE

An arbitrary spin system on a n -dimensional lattice in a strongly correlated random field is considered[1]. The random field is assumed to take the same value at all lattice sites. It is shown that in this limit the quenched and annealed distributions of the random field are equivalent. This equivalence is in accordance with the result obtained by Falk[2] for classical systems. Explicit results are presented for the one-dimensional XY-model[3] in a transverse random field.

[1] T. Horiguchi and L. L. Gonçalves, Mod. Phys. Lett. B2, 1137(1988)

[2] H. Falk, J. Phys. C9, L213(1976)

[3] H. E. Lieb, T. Schultz and D. C. Mattis, Ann. Phys. 16, 407(1961)

† Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq and Finep.

COMPORTAMENTO TERMODINÂMICO DE POLÍMEROS INTERAGENTES NA REDE DE HUSIMI.

MACHADO, K. D.; STILCK, J. F.
UFSC

Consideramos um modelo para polimerização em condições de equilíbrio químico numa rede de Husimi de coordenação igual a quatro, com interações atrativas entre monômeros que ocupam sítios primeiros vizinhos na rede e que não são monômeros consecutivos ao longo da cadeia polimérica. Este modelo tem sido usado para estudar a transição de colapso em polímeros, provocada pela competição entre as interações de volume excluído e as interações atrativas. As propriedades termodinâmicas do modelo podem ser obtidas a partir de um mapeamento bidimensional, cujos pontos fixos estáveis representam fases termodinâmicas estáveis. Notamos a ocorrência de duas fases polimerizadas distintas no diagrama de fases, quando esperávamos encontrar apenas uma. Este resultado é consistente com alguns resultados exatos na rede quadrada (1) que colocam em dúvida a natureza tricrítica do ponto Θ nessa rede. (1) B. Nienhuis, Physica A 163, 152 (1990).

Sistemas Complexos (EST) -
08/06/94

GENERALIZAÇÃO EM REDE NEURAL COM MULTIESTADOS.

DOMINGUEZ, D. R. C.; THEUMANN, W. K.
UFRGS

Um aspecto interessante de sistemas neurais, além de sua capacidade de recuperação de padrões, é a generalização¹⁾ a partir de exemplos $(\eta_{\alpha}^{\mu}, \alpha = 1, \dots, s)$, criando conceitos η^{μ} . Por outro lado, o armazenamento de sinais com multiestados²⁾ é mais realista que o de binários. Propomos um modelo onde exemplos com nível de ruído de fundo $u \equiv 1 - b$ são aprendidos, correlacionados a um conceito de acordo à distribuição de probabilidades

$$p(\eta_{\alpha}^{\mu}) = b\delta(\eta_{\alpha}^{\mu} - \eta^{\mu}) + u\delta(\eta_{\alpha}^{\mu}). \quad (1)$$

A dinâmica é introduzida por uma função de transferência: $\sigma_i^{t+1} = F_{\theta}(h_i^t)$, onde θ é o parâmetro de ganho e o campo local é dado por $h_i^t = \sum_j^N J_{ij}\sigma_j^t$. O estado do

neurônio assume valores ($\sigma = -1, 0, +1$) e a interação sináptica é dada por uma regra Hebbiana:

$$J_{ij} = \sum_{\sigma} \sum_{\mu} \eta_{\sigma i}^{\mu} \eta_{\sigma j}^{\mu} \quad (2)$$

Estudamos os pontos fixos da dinâmica e analisamos as fronteiras entre as fases de recuperação, generalização e desordenadas permitidas.

- 1) Fontanari, Meir. Phys.Rev.A,40/5(89)2806.
- 2) Bouten, Engel. Phys.Rev.E,46/8(92)1397.

UM MODELO DE VIDRO DE SPIN COM TRANSIÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM NA PRESENÇA DE UM CAMPO.

URAHATA, S. M.; YOKOI, C. S. O.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Estudamos o modelo de vidros de spin proposto por Ghatak e Sherrington (J.Phys.C, 10 3149, 1977), dado pelo seguinte hamiltoniano :

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i$$

onde D é o campo de anisotropia, H é o campo magnético e as variáveis de spin podem assumir os valores $S_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$.

Em geral, os estudos desse modelo limitaram-se ao caso $H = 0$ [Mottishaw e Sherrington (J.Phys.C, 18 5201, 1985), da Costa (Tese de doutoramento, IFUSP, 1989)]. Na aproximação de réplica simétrica obtemos os parâmetros de ordem e demais funções termodinâmicas sob regime de campo externo não nulo. Através de cálculos numéricos, obtemos as superfícies de transição de primeira ordem, bem como as superfícies de Almeida - Thouless no espaço Temperatura - Anisotropia - Campo para $S = 1$.

GENERALIZAÇÃO NUMA REDE DE NEURÔNIOS DILUÍDA

SILVA, C. R. DA

Universidade Federal de Alagoas e Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

TAMARIT, F. A.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

LEMKE, N.; ARENZON, J. J.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

CURADO, E. M. F.

Universidade de Brasília

Estudamos a capacidade de generalização numa versão assimetricamente diluída do modelo de Hopfield. Por capacidade de generalização entende-se a habilidade do sistema para criar um novo atrator que representa as propriedades comuns de um conjunto de exemplos de

um dado conceito. Resolvemos exatamente a dinâmica da rede e encontramos uma equação de recorrência para a superposição entre o estado do sistema e as memórias armazenadas. A partir desta equação podemos calcular o erro de generalização nos atratores, definido como a distância de Hamming entre o estado do sistema e um dado conceito. Provamos que ao introduzir diluição assimétrica nas sinapses melhora a capacidade de generalização e que o ruído afeta a habilidade da rede necessitando de um número maior de exemplos para generalizar. Dois casos são analisados: limite de conectividade infinita e conectividade finita. Finalmente os resultados analítico são comparados com simulações numéricas do modelo.

EFEITO DO PERÍODO REFRAATÓRIO NUMA REDE DE NEURÔNIOS

SILVA, C. R. DA

Universidade Federal de Alagoas e Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

TAMARIT, F. A.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

CURADO, E. M. F.

Universidade de Brasília

Após emitir um sinal elétrico o neurônio requer de um período da ordem de mili-segundos, chamado período refratário absoluto, para se recuperar. Durante este período ele não pode emitir um novo sinal independentemente do valor do seu potencial pós-sináptico. Depois deste breve tempo o neurônio recupera a capacidade de disparar um pulso elétrico, mas com um alto limiar de ativação, e durante um período da ordem de mili-segundos chamado período refratário relativo, este limiar decai até atingir novamente o valor de repouso. Nós estudamos como é alterada a dinâmica e a capacidade de reconhecimento do modelo de Hopfield ao introduzir os períodos refratários na modelagem dos neurônios. Eles são introduzidos como um limiar de ativação que depende do estado do neurônio em um ou vários tempos anteriores. Encontramos que o sistema apresenta além de pontos fixos, atratores com ciclo dois e atratores caóticos e analisamos as propriedades de reconhecimento do modelo.

SIMULATED ANNEALING GENERALIZADO

TSALLIS, C.; STAROLO, D. A.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Propomos um algoritmo estocástico novo ("simulated annealing generalizado") para obter o mínimo global de uma função energia/custo (não necessariamente convexa) definida num espaço contínuo D-dimensional. Estas funções geralmente apresentam uma complexa estrutura de mínimos locais e então o algoritmo estocástico

permite "tunelar" entre barreiras de energia graças ao efeito da temperatura finita, ausente em algoritmos tipo "gradient descent". Nos algoritmos conhecidos como "simulated annealing" são introduzidas uma ou mais temperaturas artificiais e gradativamente decrescidas em completa analogia com a conhecida técnica de esfriamento de metais até eles atingirem o mínimo global de energia termodinâmica. Nosso algoritmo, baseado numa generalização da estatística de Boltzmann-Gibbs, recupera como casos particulares o "simulated annealing clássico" (baseado na distribuição de Boltzmann) e o "simulated annealing rápido" (baseado na distribuição de Cauchy), e pode ser mais rápido que ambos.

SIMULAÇÃO DE SISTEMAS IMUNOLÓGICOS COM TÉCNICAS DE DINÂMICA MOLECULAR

PAPA, A. R. R.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Foram realizadas simulações para um sistema imunológico em um espaço real de dimensão dois. As populações de clones são caracterizadas pela sua posição em um espaço de configurações, cuja dimensão foi variada para estudar a influência de diferentes tipos de ligações no estado final do sistema estudado. Nas simulações foram variados diferentes parâmetros como por exemplo o tempo de vida de uma certa célula de um clone. No caso em que o tempo de vida das células foi finito, o sistema, em praticamente qualquer faixa de valor para os outros parâmetros, apresenta um tempo de vida finito; o contrário do que ocorre no caso em que a morte de células foi implementado com uma certa probabilidade, no qual, dependendo dos valores dos demais parâmetros que governam o comportamento do sistema, são obtidas as mais diferentes situações. Finalmente se faz uma comparação com outros métodos de simulação para este tipo de sistema (autômatas celulares e sistemas de equações diferenciais), alguns dos quais podem ser obtidos como casos particulares do presente estudo.

Dinâmica Caótica de Redes de Neurônios com Multi-interações

LEMKE, N.; ARENZON, J. J.

IF-UFRGS - Porto Alegre - RS

TAMARIT, F. A.

CBPF - Rio de Janeiro - RJ

A dinâmica de uma rede neural altamente diluída com multi-interações entre as sinapses agindo como correções ao modelo de Hopfield é investigada. Como no caso não diluído, os termos de ordem mais alta aumentam a capacidade de armazenamento do sistema. A dinâmica apresenta um comportamento extremamente rico, e em particular, uma fase caótica emerge dependendo do peso das conexões de ordem mais alta ε , o

ruído T e a capacidade da rede definida como a razão entre o número de padrões armazenados e a conectividade média por neurônio $\alpha = P/C$. Em $T = 0$, o sistema apresenta pontos fixos para $\varepsilon < 1$ e a capacidade máxima de armazenamento diverge para $\varepsilon \rightarrow 1$. Acima deste valor, o sistema apresenta comportamento cíclico atingindo o regime caótico através de uma cascata de bifurcações. São apresentados diagramas de fase mostrando as várias fases do sistema bem como o expoente de Lyapunov.

Simulação de Redes de Neurônios Altamente Diluídas

ARENZON, J. J.; LEMKE, N.

IF-UFRGS - Porto Alegre - RS

O modelo de Hopfield assimetricamente diluído é estudado através de simulações numéricas mostrando que resultados confiáveis podem ser obtidos mesmo sem o uso de redes exponencialmente grandes. A superposição média final, o tempo médio de convergência e uma quantidade que fornece informações sobre a importância relativa dos estados espúrios é medida como uma função da capacidade α . O valor crítico da capacidade, α_c , encontrado na simulação concorda com o valor teórico $\alpha_c = 2/\pi$. As bacias de atração são grandes e o sistema recupera uma memória se a superposição inicial é não nula. O tempo de convergência calculado analiticamente e o medido na simulação estão em acordo para $\alpha < \alpha_c$. Para tamanhos finitos da rede, o sistema apresenta estados espúrios simétricos para valores não muito pequenos de α . Entretanto, a importância relativa destes estados diminui com o tamanho do sistema.

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO MODELO DE ISING NA ÁRVORE DE CAYLEY

X. JÚNIOR, M. M.; COSTA, F. A. DA; MARIZ, A.

M.; NOBRE, F. D.

UFRN

O estudo de modelos estatísticos na árvore de Cayley tem desempenhado um importante papel na conexão entre sistemas com interações de alcance infinito (soluções tipo campo médio) e de curto alcance. Em particular, o tratamento da região central da árvore de Cayley (denominada rede de Bethe), permite a obtenção de resultados exatos de grande relevância. No presente trabalho, investigamos a propagação de danos no modelo de Ising ferromagnético definido nesta árvore. Esta técnica envolve a comparação da evolução simultânea de duas configurações do sistema, e uma questão relevante é o exame da possível conexão entre os diferentes regimes de propagação (caótico e congelado) com as fases de equilíbrio do modelo. A evolução das configurações é observada por meio de simulações de Monte Carlo, motivo pelo qual estudamos também

como as propriedades topológicas da árvore de Cayley podem exigir precauções adicionais no processo de simulação. Em particular, a escolha da forma de atualização dos spins e da região de criação do dano inicial não é necessariamente irrelevante como em redes de Bravais.

VIDRO DE SPINS MISTO COM DUAS COMPONENTES

VIEIRA, S. R.; NOBRE, F. D.; COSTA, F. A. DA
UFRN

Os modelos de vidros de spins com interações de alcance infinito têm se destacado na literatura recente por suas aplicações nas mais diversas áreas da ciência, como por exemplo, biologia e otimização. Embora a sua aplicabilidade para a descrição de sistemas reais seja a grande dúvida do momento, acredita-se que algumas das propriedades previstas pela solução de tais modelos estejam presentes em investigações experimentais. A teoria do vidro de spins de Ising com interações de alcance infinito (modelo Sherrington-Kirkpatrick) é considerada hoje como satisfatoriamente compreendida; entretanto, modelos mais complexos, apresentam inúmeras questões em aberto. No presente trabalho, consideramos um modelo de vidro de spins misto definido em termos de dois grupos constituídos respectivamente, por variáveis do tipo XY e planares discretas (relógio com p estados); somente interações inter-grupos são permitidas. Um termo de anisotropia que privilegia p direções em um plano é introduzido para as variáveis XY de tal forma a permitir flutuações em torno do limite relógio. Analisamos o procedimento de quebra da simetria entre réplicas, onde diferentes tipos de funções parâmetro de ordem são estudadas.

Optimal Generalization in Linear Perceptrons

KINOCHI, O.; CATICHA, N.
USP

The spherical perceptron with linear output does not present optimal generalization if trained by minimization of the conventional quadratic cost function $E = \frac{1}{2} \sum_{\mu}^{\alpha N} (b_{\mu} - h_{\mu})^2$, where b_{μ} and h_{μ} are the outputs of the rule (teacher) and hypothesis (student) networks. We derive an optimal algorithm for on-line learning and show by a replica calculation that it is also optimal for exhaustive learning. The optimal learning energy has the form $E_{opt} = -T \sum_{\mu}^{\alpha N} \ln P(\hat{b}_{\mu} | \hat{h}_{\mu}) - T \ln Z$, where Z is a normalization constant, $P(\hat{b} | \hat{h})$ is the conditional probability of the normalized data \hat{b} given the normalized hypothesis output \hat{h} and $T(\alpha)$ is a learning parameter which decreases during learning following a simple schedule function.

Aprendizagem no Perceptron Binário por Algoritmo Genético não local

SIMONETTI, R.; CATICHA, N.
USP

No estudo das Redes Neurais Artificiais, uma das áreas mais ativas é a da busca de algoritmos de aprendizagem mais eficientes. Dentre esses algoritmos, existe uma classe que tem despertado grande interesse ultimamente: as Redes Neurais Artificiais Evolutivas (RNAE).

Essa busca pode ser entendida sob dois aspectos principais: o interesse em melhorar a compreensão dos processos adaptativos que ocorrem na natureza e a possibilidade de se desenvolver sistemas artificiais mais eficientes.

Um representante deste tipo de algoritmo é conhecido como Algoritmo Genético (AG), que recebe este nome pois seu mecanismo se inspira em algumas idéias naturais de reprodução e evolução genética.

Neste trabalho estudamos um novo AG para treinamento do perceptron binário inspirado em métodos de Monte Carlo com variáveis não locais. Os resultados, embora preliminares, mostram que não só existe a possibilidade de encontrar AG mais rápidos, ou seja que convergem em um número menor de gerações, mas também mais eficientes, no sentido que maiores probabilidades de generalização são obtidas para conjuntos de treinamento semelhantes.

TRANSIENT TIMES AND PERIODS IN THE HIGH-DIMENSIONAL SHAPE-SPACE MODEL FOR IMMUNE SYSTEMS

SANTOS, R. M. Z. DOS
Universidade Federal Fluminense

A simplified version of the cellular automata introduced by De Boer, Segel and Perelson in the shape-space model, to describe the interaction of different types of B cells in the immune system, indicates the existence of a threshold separating the periodic regime from the chaotic one, on the high-dimensional finite lattices. We study the behavior of the periods of the limit cycles nearby the transition threshold as well as the behavior of the transient times necessary to attain the attractors in the periodic regime. We find that both become large close to the threshold. The very large but finite periods may be related to large but finite clusters of activated sites, which could be interpreted as a long chain of activation. In other words, even before the chaotic regime is reached, the system is already trapped in a sort of non-healthy state. Nevertheless the system will never attain it, because the transient times in this region are much larger than the usual average lifetime of the system.

PROPAGAÇÃO DE DANOS NO ENSEMBLE MICROCANÔNICO

SOUSA, A. J. F. DE

Departamento de Física - UFPE e Departamento de Física e Matemática - UFRPE

MOREIRA, F. G. B.

Departamento de Física - UFPE

MARIZ, A. M.

Departamento de Física - UFRN

A quase totalidade dos trabalhos sobre propagação de danos utilizam dinâmicas estocásticas (e. g. Heat-Bath, Glauber, Metropolis) para estudar a evolução dinâmica de duas configurações do sistema no ensemble canônico. Na presente comunicação consideramos a propagação de danos no modelo de Ising, usando uma dinâmica determinística proposta por Creutz [1] para gerar configurações de equilíbrio no ensemble microcanônico. Através da simulação do sistema em redes quadradas de vários tamanhos, observamos a evolução temporal de duas configurações que apresentam, inicialmente, diferentes tipos de danos. Nossos resultados para a distância Hamming são comparados com os resultados de estudos anteriores no mesmo modelo e que utilizam dinâmicas estocásticas.

[1] M. Creutz, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1141 (1983).

MODELO COMPUTACIONAL DO ESPALHAMENTO DO VÍRUS DO HERPES SIMPLES.

CAMELO NETO, G.; COUTINHO, S.

Universidade Federal de Pernambuco, Recife.

Um modelo simples, tipo automata celular, para simular a proliferação do vírus do Herpes simples (HSV sigla em *inglês*), proposto originalmente por Landini *et al* [1] é estudado. Neste modelo, duas populações de células com diferentes graus de resistência à infecção são inicialmente distribuídas aleatoriamente em uma rede quadrada contendo uma célula infectada na região central. Várias regras de propagação são consideradas de acordo com o número de vizinhos infectados para cada população reproduzindo resultados prévios [1]. O espalhamento do HSV apresenta algumas singularidades que permitem sua reprodução por um algoritmo simples. Simulações computacionais foram realizadas introduzindo-se novos ingredientes às regras visando simular efeitos temporais de retardo ao processo de infecção. Os resultados são analisados e comparados com aqueles obtidos por Landini *et al* [1].

[1] Gabriel Landini, Gary P. Misson e Philip I. Murray, *Proc. of the IFIP International Working Conference on Fractals in the Natural and Applied Sciences - FRACTAL 93*, ed. M. M. Novak, (Elsevier, Amsterdam, (1993)

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DE MACROMOLÉCULAS DENDRÍTICAS COM CURVATURA NEGATIVA

PADUA, A. DE; MORAES, F.

Depto. de Física - UFPE

XAVIER JR, I. M.; PORTELA, C. F.

Depto. de Química Fundamental - UFPE

Dendrímeros de hidrocarbonetos macromoleculares têm sido objeto de grande interesse na literatura recente (para uma revisão veja D.A. Tomalia, A.M. Naylor and W.A. Goddard III, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **29**, 138 (1990)). Dendrímeros são estruturas altamente ramificadas apresentando uma conformação globular que contém grandes vazios, reentrâncias e ondulações no seu interior, uma característica de superfícies de curvatura negativa. Por sua simplicidade, a macromolécula mais favorável a ser explorada no momento é talvez a de fórmula $C_{1134}H_{1146}$, um dos maiores hidrocarbonetos já sintetizado (Z. Xu and J.S. Moore, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **32**, 246 (1993)). Este hidrocarboneto tem uma estrutura dendrítica que consiste de 94 monômeros de fenilacetileno dispostos em um esqueleto que é isoformo à rede de Bethe. Neste trabalho adaptamos o modelo geométrico da rede Bethe embebida em uma superfície de curvatura negativa constante (J.A. de Miranda-Neto and F. Moraes, *J. Phys. I (France)* **2** 1657 (1992), *ibid* **3**, 29 (1993)) ao $C_{1134}H_{1146}$ e fazemos uso de suas simetrias para inferir propriedades estruturais como comportamento de escala, o perfil da densidade e a distribuição radial de seus monômeros. Os resultados são consistentes com as simulações em computador de Lascanec e Muthukumar (R.L. Lascanec and M. Muthukumar, *Macromolecules* **23**, 2280 (1990)).

CAPACIDADE DE ARMAZENAMENTO DE PADRÕES DE UM MODELO DE REDE NEURAL HIERÁRQUICA

MIRANDA, L. C. B.; RIERA, R.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

É estudado um modelo de rede neural onde as memórias são não correlacionadas e estão armazenadas segundo uma arquitetura na qual blocos de espins ativos e não ativos estão dispostos de forma hierárquica. A capacidade de armazenamento da rede é medida pela razão $\alpha = p/N$ (p -número de memórias e N -número de neurônios). Resultados preliminares para o valor α_c , a partir do qual não é observada a propriedade de memória associativa, fornecem o valor $\alpha_c = 0.3$. Este fato indica que este modelo de rede neural possui capacidade de armazenamento de padrões maior do que o modelo de Hopfield usual.

ESTADOS META-ESTÁVEIS NA APRENDIZAGEM POR EXEMPLOS

KREBS, P. R.
UFPEL - UFRGS
THEUMANN, W. K.
UFRGS

A existência de estados meta-estáveis que não aparecem nos cálculos termodinâmicos tem sido objeto de estudo em vidros de spin e em redes de neurônios. Estes estados, de fundamental importância no comportamento dinâmico destes sistemas, explicam as grandes magnetizações remanentes obtidas através das simulações numéricas. O número de tais estados cresce exponencialmente com o tamanho do sistema (N). A contagem do número de estados meta-estáveis permitiu-nos estabelecer um limite inferior para a capacidade crítica (α_c) e para o número crítico de exemplos (s_c) necessários para que a rede atinja a fase de generalização. Observamos a existência de três bandas distintas de estados meta-estáveis em função da correlação entre exemplos e conceitos (b), da capacidade da rede (α) e do número de exemplos (s). As bandas estão associadas aos conceitos, aos exemplos e a um conjunto de estados descorrelacionados dos exemplos e conceitos. Para tornar clara as regiões de existência de estados meta-estáveis, construímos diagramas para os "overlaps" assimétricos dos exemplos ($m_{11} \times m_{s-1}$) identificando as regiões de generalização, recuperação e de estados descorrelacionados. Os resultados obtidos a partir do cálculo do número de estados meta-estáveis permitem uma melhor compreensão dos resultados obtidos a partir da teoria de campo médio (P. R. Krebs and W. K. Theumann, J. Phys. A: Math. Gen. 26 (1993) 3983-3993).

MODELO ESTOCÁSTICO DE GÁS DE REDE PARA UM SISTEMA PREDADOR-PRESA.

SATULOVSKY, J. E.; TOMÉ, T.
USP

Propomos um modelo estocástico de gás de rede para descrever a dinâmica de duas espécies animais, uma sendo a presa e a outra o predador. Nosso modelo compreende os mecanismos do modelo de Lotka-Volterra. Tanto as presas como os predadores têm taxas de reprodução autocatalítica: os primeiros às custas de sítios vazios e os segundos às custas dos primeiros. Os predadores têm uma taxa de morte espontânea. Nosso análise foi feita usando uma aproximação de campo médio dinâmico e simulações computacionais. Os resultados mostram que o sistema apresenta um comportamento oscilatório nas densidades das populações de presas e predadores. Para o conjunto de parâmetros utilizados nas simulações, as oscilações são de caráter local. Os resultados de campo médio predizem a existência de estados coletivos oscilatórios.

FLUXOS PROPULSORES DA FORMAÇÃO DE MÚLTIPLAS BANDAS COLORIDAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE

SOUSA, K. M. O. DE; PRAZERES, G. M. P.
UFMA
COSTA, M. C. P.
Pesquisadora/CNPq

A formação de múltiplas bandas coloridas em células de diálise está incluída no novo campo do conhecimento denominado "A Gênese da Ordem a partir da Desordem" - um novo campo de pesquisa em morfogênese e em biogênese. O objetivo deste trabalho é determinar os fluxos propulsores da formação de estruturas temporais e espaciais em células de diálise. A metodologia inclui as seguintes etapas: 1- montagem de células de diálise; 2- formação de gradientes de densidade usando como solução Ficoll-Sacarose e como solvente Sacarose-Tampão Tris-HCl; 3- experimentos de osmocentrifugação zonal de amostra de hemoglobina humana, seguido de experimento de osmossedimentação. Os resultados experimentais indicam: 1- o acoplamento osmótico, na osmossedimentação (força osmótica e força gravitacional) e na osmocentrifugação (força osmótica e força centrífuga) é o responsável pelo rápido deslocamento das partículas de proteína; 2- o fluxo intenso por ultrafiltração centrífuga na base da zona principal de hemoglobina e a combinação dos fluxos por osmose e osmose-reversa são propulsores da formação das múltiplas bandas; 3- O depósito de proteína observado no fundo da célula pode ser originado pela desorganização das estruturas ao atravessarem o ponto de fluxo zero na célula de diálise; 4- Este depósito de proteína pode ser a zona de alimentação das estruturas observadas na região inferior da célula. Conclusão: dependendo da região da célula tem-se um fluxo propulsor da formação de múltiplas bandas coloridas por toda célula de diálise.

FROM DISORDERED TO ORDERED MOVEMENT: ATTRACTOR CONFIGURATION AND DEVELOPMENT

CARVALHO, A. M. DE A.
Instituto de Psicologia - USP
HAMBURGER, A. I.
Instituto de Física - USP
PEDROSA, M. I. P. DE C.
Departamento de Psicologia, Universidade Federal de Pernambuco

Self-organized, collectively ordered states of a system will be discussed as resulting from the interactive co-regulating actions of its component individuals. Our framework of thought considers the dynamics between a deterministic law of correlations - a causal principle

which leads to the collective whole - and the spontaneous, indeterministic decisions at the "free" individual level (as in Epicuro's "clinamen" in his early version of Brown's molecular motion). An observed episode, where 30-36 months children self-organize themselves in a circular attractor configuration, will be described and analysed. Changes in the order-disorder pattern of organization were observed following certain communication actions which are taken as potential organizational poles and as indicators of correlations in the system. The concepts of development (evolution and time) and the novelty (change) will be related to the concept of transformations (reorganizations), including the emergence of qualitatively different states (origins), in an effort to delimit the "space of significations" being dealt with. The analysis refers to reciprocally constitutive interactions: individual - self and individual - external factors, physical and social. The attractor situation, in the sense of an equilibrium or stable configuration following a collective action, is discussed as a regulating factor of affective and rational development.

NÃO UNIVERSALIDADE NUM MODELO DE CRESCIMENTO CINÉTICO

GOMES JÚNIOR, S. R.; LUCENA, L. DOS S.; SILVA, L. R. DA

Departamento de Física da UFRN, Campus Universitário, Natal RN 59072-970

TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro

Num trabalho recente¹ propusemos uma generalização do Modelo de Crescimento Cinético acrescentando dois novos ingredientes: a possibilidade de ramificação e uma desordem congelada do meio. Este modelo generalizado revelou uma fenomenologia bastante rica incluindo efeitos não lineares e comportamento crítico. No espaço dos parâmetros definido pela probabilidade de ramificação b e pela concentração de impurezas c , localizamos uma linha crítica caracterizada por um parâmetro de ordem nulo e por um comprimento de correlação divergente. Outra característica desta linha é apresentar uma distribuição tipo lei de potência para a polidispersão, em contraste com os outros pontos do plano (b, c) nos quais esta distribuição é do tipo exponencial negativa. Os primeiros resultados parecem indicar uma única classe de universalidade para os pontos desta linha crítica, embora não se pudesse descartar a outra hipótese. Neste trabalho, através de simulações mais extensas e precisas, investigamos a variação dos expoentes e da dimensão fractal dos aglomerados ao longo da linha crítica. Os resultados são consistentes com a não universalidade. Especial atenção foi dada ao ponto $(b = 1, c = 0.4072)$ que corresponde ao crescimento de macromoléculas dentro de um fractal. ¹ L.S.

Lucena et al., *Phys. Rev. Letters*, **72**, 230 (1994)

Estudo da estrutura de mínimos do Perceptron Binário

MATTOS, C. R. DE; CATICHA, N. USP

O perceptron binário, sem camadas escondidas, que aprende por exemplos gerados por uma rede professor é um dos sistemas complexos mais simples para ser estudado e por tanto, bastante interessante. Os vários algoritmos de aprendizagem, que hoje existem, podem ser entendidos como processos de minimização de uma função energia. Existe evidência de que, em outras redes, os algoritmos do tipo Estabilidade Esperada levam à máxima generalização possível. Usando o perceptron binário estudamos a estatística de mínimos da função energia para esta classe de algoritmos, onde a energia é função da probabilidade condicional $P(\sigma_\mu | h_\mu)$, com o objetivo de controlar a complexidade do problema de aprendizado.

ALMEIDA-THOULESS INSTABILITY IN THE QUADRUPOLEAR GLASS

DOMINGUES, D. N.; KOKSHENEV, V. B. *Universidade Federal de Ouro Preto*

The important question in the theory of spin glass, is whether a sharp transition can occur at finite temperature. The hypothesis [1] that orientational quadrupolar glass in ortho-para hydrogen mixture is an analog of spin glass in magnetically dilute systems has stimulated numerous attempts to detect, by means of NMR, the glass boundary. The Sherrington-Kirkpatrick Ising-type model with infinite-range interaction which includes an external magnetic field is exceptionally important in the understanding of real spin glasses. In particular, stability analysis of this model in replica representation allowed the spin glass boundary [2] which proved to be applicable not only to the real metallic systems, but also for dielectric compounds with short-range interaction. In the framework of pseudo-spin approach [3] the orientational quadrupolar glass can be treated as the two-component pseudo-spin short-range model with internal (intrinsic) crystalline-type temperature-concentration-dependent field. Within the scope of this model we estimated the thermodynamical instability of orientational glass to build its phase diagram in the temperature-concentration plane. The comparison with static and dynamic NMR data is carried out. Financial support: FAPEMIG.

[1] N.S.Sullivan, M.Devoret, B.P.Cowan and C.Urbina, *Phys.Rev.*B17,5016 (1987)

[2] J.R.L. de Almeida and D.J.Thouless, *J.Phys.* A11, 983 (1978)

[3] V.B.Kokshenev, *Phys.Stat.Solids(b)*, 164, 83 (1991)

INTRINSIC FIELDS IN THE ORIENTATIONAL QUADRUPOLE GLASS PROBLEM

KOKSHENEV, V. B.

Universidade Federal de Ouro Preto

The existence of intrinsic fields, specific to molecular crystals with quadrupole-quadrupole intermolecular interactions, has been evidenced from NMR experiments, Monte Carlo simulations and high temperature theoretical estimations. The presence of these fields is the main difference between quadrupole and dipole spin glasses. The emergence of presumably large intrinsic fields conjugate to the local parameter order prevents sharp transition to spin glass-like states of the quadrupole glass. The first explicit estimations of the intrinsic fields for cases of ortho-para-Hydrogen mixtures are presented. This analysis, when given beyond the scope of virtual crystal approximation, leads to statistical independence of intrinsic fields to the random bond interactions. It is also shown that these fields have a fluctuation nature, related to the Onsager reaction fields and can be described effectively in terms of Zeeman-type fields. Our estimations show that under certain temperature-concentration conditions, it is possible to reach a collective freezing regime when the competing molecular field exceeds the intrinsic field. Therefore, the orientation motion of quadrupoles can be frozen into nonergodic metastable quadrupole glass states even in presence of smearing intrinsic fields. Financial support: FAPEMIG

REDES NEURAIS COM ESTRUTURA NO ESPAÇO DE SÍTIOS E PADRÕES COM TENDÊNCIA

COSTA, R. A. L.; THEUMANN, A. G. R. DE
UFRGS

Analisamos, neste trabalho, as propriedades de recuperação de uma rede neural, onde os neurônios estão organizados em blocos, 'clusters', através de uma estrutura hierárquica. Estudamos o comportamento das soluções de campo médio para redes neurais com duas diferentes regras de aprendizado. Para a primeira *regra de aprendizado local* determinamos as propriedades dos estados de recuperação: $\mathbf{m}_s = (m_s^1, m_s^2, 0, 0, \dots, 0)$, onde m_s^1 e m_s^2 estão associados a padrões armazenados com tendência, 'bias'. Mostramos que o estado misto do ancestral possui ordenamento contínuo e é o mínimo global da densidade de energia livre, enquanto o ordenamento dos descendentes é descontínuo. Para uma rede que possua uma *regra de aprendizado modificada não local*, analisamos o comportamento, não apenas dos estados de descritos acima, mas também do estado de Mattis. Encontramos que, para o estado de Mattis, o ancestral com $\kappa = 0$ possui ordenamento contínuo e o ancestral com $\kappa \neq 0$ e os descendentes, para todos os

valores de κ , possuem ordenamento descontínuo. O estado simétrico, diferentemente da situação anterior, é estável a $T = 0$ e possui ordenamento contínuo apenas para o ancestral com o valor do parâmetro $\kappa = 0$. À $T = 0$ encontramos que a solução com $m_s^1 \neq m_s^2$ existe apenas quando $|\kappa| = \tilde{\kappa}$, onde definimos $\tilde{\kappa} \equiv \sqrt{s} - 1$. Concluímos este trabalho com uma discussão da relação sinal-ruído, na rede com regra de aprendizado modificada, com um número extensivo, $p = \alpha N$, de padrões armazenados e todos possuindo tendência, o que nos permite obter a fração de armazenamento crítica: α_c^s , a qual depende do índice s o qual indica o nível na hierarquia.

Sistemas Quânticos e Sistemas Desordenados (EST) - 09/06/94

CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN PARA ALCALINOS

BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP

O recente desenvolvimento de técnicas que permitem a obtenção de vapores atômicos à temperaturas da ordem de 10^{-6} K, abre possibilidades para estudos de gases quânticos num regime de baixas densidades. Entre vários estudos possíveis de serem realizados, a Condensação de Bose-Einstein (CBE) aparece como importante efeito quântico coletivo ainda pouco explorado, principalmente devido as dificuldades em se obter sistemas gasosos a tão baixas temperaturas.

Gases de Na, Cs e Rb têm sido obtidos à temperaturas de alguns μ K e densidades entre $10^{10} - 10^{12} / \text{cm}^3$. Nestas densidades a ocorrência de colisões binárias é bastante importante e a forte interação existente entre alcalinos altera as propriedades e a temperatura de ocorrência da CBE.

Neste trabalho estamos estudando teoricamente o efeito da interação para gases confinados em potenciais e resfriados via pressão de radiação. Correções na temperatura crítica são estimadas através de correção em primeira ordem no parâmetro (a/λ) (comprimento de espalhamento / comprimento de onda de De Broglie). Situações possíveis de serem obtidas em laboratório são analisadas. Variação nas propriedades causadas pela presença da interação são analisadas.

UM SISTEMA UNIDIMENSIONAL DE FERMÍ NÃO MASSIVO QUE EXIBE COMPORTAMENTO DO TIPO ISING

HURD, T.

McMaster Univ. - Canada

MARCHETTI, D. H. U.

IFUSP

VEIGA, P. F. DA

USP-SC

Examinamos as propriedades de uma medida de probabilidade em \mathbf{R}^L que surge da aplicação da fórmula de Matthews-Salan a um sistema unidimensional fermiônico não massivo. Mostramos que esta medida, no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$), comporta-se como a medida de equilíbrio do modelo unidimensional de Ising. A demonstração deste resultado é baseada na representação do determinante de Fredholm como a função geratriz de um problema de monomero-dímero. Várias estimativas assintóticas são necessárias para a obtenção da contribuição máxima desta medida. Discutimos ainda a relação dos resultados obtidos com o problema de geração espontânea de massa, fenômeno este que ocorre nos estados BCS resultantes da formação de pares de Cooper.

ESTADOS ASSINTÓTICOS NA DINÂMICA DA DIFUSÃO ASSIMÉTRICA E NA REAÇÃO $A + B \leftrightarrow \emptyset$ A PARTIR DE MODELOS DE HEISENBERG QUÂNTICOS

ALCARAZ, F. C.

Dept. Física - UFSCar

Calculamos exatamente a distribuição de probabilidades no estado de equilíbrio em alguns modelos dinâmicos em d -dimensões ($d \geq 1$). Consideramos dois tipos de modelos. No primeiro deles consideramos apenas os processos de difusão assimétrica, em que as partículas se movem preferencialmente em dada direção (o processo não tem simetria quiral). No segundo modelo temos duas espécies de moléculas que além de difundirem também estão sujeitas à reação de aniquilação $A + B \leftrightarrow \emptyset$. Este segundo modelo foi também estudado na sua versão assimétrica. Nossos resultados são obtidos considerando a equação mestra que rege os modelos acima como uma equação de Schrödinger com tempo imaginário. Os Hamiltonianos assim obtidos podem ser interpretados como Hamiltonianos quânticos de modelos de spin. Os modelos dinâmicos que estudamos relacionam-se com o Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico de spin $S = \frac{1}{2}$, no caso de difusão simple assimétrica e $S = 1$, no caso em que a reação de aniquilação é incluída. Em ambos os modelos dinâmicos a assimetria dos processos relaciona-se com a anisotropia do modelo quântico de spin associado.

DENSIDADE DE ESTADOS E EXPOENTE DE LIAPUNOV DE CADEIAS DESORDENADAS

OLIVEIRA, M. J. DE

USP

PETRI, A.

USP e Istituto de Acustica (CNR), Roma, Itália

A densidade de estados e o expoente de Liapunov de cadeias desordenadas são calculadas através de um método numérico tipo Monte Carlo. Usamos uma representação do problema como um passeio aleatório (markoviano), de tempo discreto n , ao longo do eixo z . A posição z_n do passeante no n -ésimo instante se identifica com a razão entre os deslocamentos dos átomos $n - 1$ e n . A fração do tempo de permanência do passeante na parte negativa de z se identifica com a densidade de estados integrada. Aplicamos o método para os casos de desordem diagonal e não diagonal. Em particular estudamos o caso de desordem não diagonal com distribuição de probabilidades proporcional a $K^{-\alpha}$.

MAGNETIZATION JUMPS IN THE HYSTERESIS CURVES OF THE DILUTED ANTIFERROMAGNET $K_2Fe_xIn_{1-x}Cl_5H_2O$

PADUAN FILHO, A.; BECERRA, C. C.; BARBETA, V.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

SHAPIRA, Y.

Tufts University, USA

PALACIO, F.

Universidade de Zaragoza, Espanha

Single crystals of the dilute easy-axis antiferromagnet $K_2Fe_xIn_{1-x}Cl_5H_2O$ exhibit a remanent magnetization below the Neel temperature T_n [1] if the samples are cooled in a finite magnetic field. The remanent moment as a function of the cooling field saturates in fields as low as 1 Oe. Isothermal hysteresis loops, M versus H , were measured on a sample with $x=0.04$ at several temperatures below $T_n=13.2$ K. The hysteresis loops were obtained after cooling from above T_n in a field of 1 Oe, applied along the easy axis. The loops were measured in fields up to 10 kOe. The hysteresis loops were not symmetric, but the most striking effect was the existence of a series of well defined magnetization jumps in the M versus H curves. This behavior suggests that a domain structure is present below T_n , and that the jumps are due to abrupt changes in this structure, e.g., abrupt domain-wall motion. The origin of the remanent magnetization in this and other dilute antiferromagnets has not yet been established. Domain-wall magnetization (for antiferromagnet domains), and piezomagnetic effect, have been suggested as possible causes. [1].J.Phys.:Condens.Matter 5 L107(1993)

ORIENTATIONAL GLASS. ANALOGY WITH SPIN GLASS

KOKSHENEV, V. B.

Universidade Federal de Ouro Preto

The glassy behavior has been observed in solids some of whose regular sites was occupied by constituents containing a quadrupolar moment. Molecular mixtures of Nitrogen-Argon type (classical case) and ortho- para Hydrogen (quantum case) exemplify such solids. As a result of dilution by spherically symmetric molecules a gradual slowing down of rotational motion of quadrupoles takes place and a freezing into a configuration of orientational glass occurs with avoiding of the long-range orientational order [1]. As in the case of spin glasses this configuration is due to the highly frustrated competing intermolecular interactions. The essential difference between both types of glasses comes from the presence of additional internal random fields characteristic to orientational glasses. These caused by the lattice distortion (strain fields) and pseudo-spin nature of dynamic quadrupolar variables (intrinsic fields). We review NMR, Monte Carlo simulation and thermodynamical evidences for the freezing into orientational glass. We emphasize the analogy between orientational and spin glasses which can be shown in the framework of the two-component isotropic model suggested for orientational glass [2]. Financial support: FAPEMIG.

[1] U.T.Hochli, K.Knorr and A.Loidl, *Adv. in Phys.* 39, 405 (1990)

[2] V.B.Kokshenev, *Phys.Rev.B.*, to be published

PROPAGAÇÃO DE DANOS EM UM FILME FINO FERROMAGNÉTICO DE ISING

COSTA, U. M. DE S.

Departamento de Física - Universidade Federal de Alagoas - Maceió - AL

ROZKDESTVENSKY, I. V.

Department of Physics - University of Western Ontario - London - Ontario-Canada

Aplicamos a técnica de propagação de danos a um filme fino ferromagnético de Ising spin 1/2. Usamos a dinâmica de Metropolis para calcular a dependência da distância de Hamming bem como sua distribuição com a temperatura. Sugerimos uma modificação do algoritmo de cálculo da distância de Hamming no caso da dinâmica de Metropolis e discutimos os resultados para o sistema bi-dimensional. Para um filme com três camadas obtemos a dependência térmica da distância de Hamming e de sua distribuição bem como sugerimos uma nova maneira de se introduzir o dano através de condições de contorno discutindo o resultado desse novo método.

UNIVERSALITY, THRESHOLDS AND CRITICAL EXPONENTS IN CORRELATED PERCOLATION

CHAVES, C. M.; KOILLER, B.

Departamento de Física, PUC-Rio

Correlated percolation models are systems where sites in a lattice are occupied randomly and then sites are removed (bootstrap percolation) or added (diffusion percolation) according to their environment. Results for critical concentrations and exponents of bootstrap and diffusion site-percolation models are presented for fairly large square and honeycomb lattices. Calculations are based on numerical simulations, which are consistent with an universal ν exponent. For the range of bootstrap and diffusion problems considered in this work, β remains the same as for the usual random percolation. Evidences from the numerical simulations and renormalization group methods lead to the present understanding that ν is universal for all models, depending only on the space dimension, while β may depend on ℓ , the number of occupied neighbors. Our work suggests that this understanding may not be correct and β could also be universal.

Caos, Dinâmica e Instabilidades (EST) - 09/06/94

Ordem de longo alcance com caos local em redes de equações diferenciais acopladas.

BRUNET, L. G.

UFRGS

CHATÉ, H.; MANNEVILLE, P.

SPEC/CEA-Saclay.

Investigamos a existência de comportamento coletivo não trivial em redes de equações diferenciais difusivamente acopladas. Observamos ordem de longo alcance para uma rede quadrada bidimensional de sistemas Rössler. Mostramos que este caso é bem descrito através de uma equação de Ginzburg-Landau complexa (GLC) sujeita à ruído local produzido pelas unidades caóticas de Rössler. Devido à estabilidade e coerência espacial encontradas em soluções numéricas bidimensionais (espirais ou aglomerados destas), estimou-se, através de estudos unidimensionais, que os parâmetros desta equação de GLC estejam na região "Benjamin-Feir estável". Assim as oscilações coletivas encontradas nas simulações correspondem às soluções linearmente estáveis e espacialmente homogêneas da equação GLC equivalente.

ANÁLISE R/S DO ATRATOR CAÓTICO DO MAPEAMENTO $1 - a |\xi_t|^2$

SILVA, L. R. DA; NASCIMENTO, H. A. D. DO
 Departamento de Física da UFRN, Natal RN 59072-970
 BEER, R.; TSALLIS, C.
 Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro

Séries temporais irregulares aparecem em muitas áreas da Física tais como Caos, turbulência, fluidos, precipitação de chuvas e outros fenômenos meteorológicos, manchas solares, nível de lagos e rios, Economia, descargas elétricas, roletas e outros jogos de azar, etc. O desafio básico em todos estes problemas é estimar o próximo passo, isto é, usando a informação contida na série temporal disponível, prever o que vai acontecer na próxima etapa. Ao longo do tempo muitos métodos têm sido propostos para abordar este problema. Nós tratamos aqui da conhecida análise R/S, proposta por Hurst cem anos atrás e formalmente desenvolvida por B. B. Mandelbrot e J-R. Wallis, que tem mostrado, mais e mais, ser um poderoso instrumento para este fim. Neste trabalho, fazemos a análise R/S (expoente $H(z, a)$ de Hurst e amplitude $A(z, a)$) do mapeamento numérico dado pela equação

$$\xi_{t+1} = 1 - a |\xi_t|^2$$

onde $0 \leq a \leq 2$. Também estudamos em detalhe as densidades de visitas $D_z \xi$. Formas analíticas são propostas para $z = 1/2$ e $z = 1$.

INSTABILIDADES MORFOLÓGICAS EM INTERFACES FORA DO EQUILÍBRIO

MESQUITA, O. N. DE; FIGUEIREDO, J. M. A.
 Departamento de Física - ICEx - UFMG

Quando um sistema é tirado do equilíbrio, podem ocorrer instabilidades com conseqüente formação de estruturas espaciais, que chamamos de padrões. Em geral, as equações dinâmicas que descrevem este fenômeno são não lineares, permitindo várias bifurcações das soluções estacionárias e eventualmente levando o sistema a um estado caótico.

Apresentaremos resultados experimentais sobre a instabilidade celular na interface nemático-isotrópica em movimento, do cristal líquido 8CB. Competição entre modos espaciais da interface é observada, sendo possivelmente causada por uma instabilidade de Eckhaus (difusão de fase). Estamos propondo esta instabilidade como um dos mecanismos possíveis de seleção de vetores de onda nestes padrões.

Comparações entre nossos dados experimentais e teorias sobre a instabilidade celular durante solidificação direcional de ligas binárias serão apresentadas.

J.M.A.Figueiredo, M.B.L.Santos, L.O.Ladeira and O.N.Mesquita, Phys. Rev. Letters 71, 4397 (1993).

CAOS, FRACTAIS, SONS E IMAGENS

OLIVEIRA, L. J. P. DE
 Universidade Estadual do Ceará
 ROCHA, E.; FREIRE, V. N.
 Universidade Federal do Ceará.

A teoria de sistemas caóticos e fractais é utilizada para geração de sons e imagens em tempo real. A representação visual de fractais e a música a ela associada são produzidas através de mapas de Hénon, caos no torus, sistema de Lorenz, sistema de Hénon-Heiles, etc. Os quadros fractais têm suas cores selecionadas a partir de certas regras estabelecidas e associadas aos processos iterativos dos modelos, da mesma forma que as freqüências, intensidades, durações, timbres, etc que constituem a música. Os resultados, *i. e.* caos, fractais, sons e imagens são apresentados em tempo real com utilização de tecnologia MIDI (Musical Interface for Digital Instruments). A partir da textura do sinal produzido pelos sistemas caóticos, filtros e regras composicionais são empregados com o objetivo de produzir partituras em notação tradicional para execução em instrumentos acústicos. Uma apresentação ao vivo de caos, fractais, sons e imagens será realizada.

AVALANCHES NUM PLANO INCLINADO

BRITO, V. P.
 Departamento de Física - UFPI, 64049-550 Teresina-PI,
 Brasil
 GOMES, M. A. F.
 Departamento de Física - UFPE

A estatística de avalanches em materiais granulares tem sido objeto de grande interesse nos últimos anos, sobretudo em conexão com sistemas de não-equilíbrio e o conceito de criticalidade auto-organizada. No presente trabalho reportamos e analisamos resultados de extensivas medidas no deslizamento de diferentes corpos sólidos em um plano inclinado, para ângulos próximos ao ângulo crítico controlado pelo coeficiente de atrito estático. Neste problema, os deslizamentos são iniciados por uma pequena perturbação externa controlada e as condições macroscópicas iniciais são rigorosamente as mesmas, mas na interface corpo deslizante-plano inclinado existe ruído microscópico que interfere nas condições iniciais e acarreta uma distribuição estatística complexa de avalanches ou deslizamentos.

TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS DE UMA LIGA BINÁRIA BIDIMENSIONAL. ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR.

GONÇALVES, S.; IGLESIAS, J. R.; MARTÍNEZ, G.
 Instituto de Física, UFRGS

Usando um modelo de potencial simples estudamos, por meio de dinâmica molecular a temperatura constante, o diagrama de fases de uma liga binária bidimensional

em função do parâmetro definido como a razão dos tamanhos dos átomos componentes (λ). Começando com uma liga sólida perfeitamente ordenada a baixa temperatura, que é estável para $\lambda = 0.3$, e mudando lentamente esse parâmetro, achamos uma transição de fase de primeira ordem para $\lambda = 0.5$ a uma estrutura ordenada caracterizada por ter pares de átomos em duas orientações a 90° uma da outra, e mais uma transição para um $\lambda = 0.85$ a uma fase amorfa. A transição inversa (do estado amorfo ao estado ordenado) é pouco provável - ela mostra histereses - para nossos modestos tempos de simulação e tamanhos do sistema. Por outro lado, fazendo tratamentos térmicos surgem configurações metaestáveis contendo domínios com alto grau de ordem. As estruturas obtidas tem uma grande riqueza estrutural para o pequeno tamanho do sistema estudado (100 átomos).

Física Matemática e Sistemas Quânticos (EST) - 09/06/94

ORDEM DE LONGO ALCANCE EM CADEIAS ANTIFERROMAGNÉTICAS DE HEISENBERG.

PARREIRA, J. R.; BOLINA, O.; PEREZ, J. F.
USP

Neste trabalho são estudadas cadeias antiferromagnéticas de Heisenberg. As interações são admitidas como sendo de longo alcance e não competitivas. A interação possui decaimento polinomial com a distância relativa entre os pontos da rede. Utilizando a propriedade de positividade por reflexão, conforme utilizada por Frohlich, Israel, Lieb e Simon, estabelecem-se limites infravermelhos para a função de correlação de dois pontos. Com isso demonstra-se a existência de ordem de longo alcance para o modelo em temperatura nula se o spin considerado for suficientemente grande. Este resultado é válido mesmo para o caso de spin meio, contanto que o decaimento das interações seja suficientemente lento.

DO GAP DE ENERGIA NO ESTADO FUNDAMENTAL DE CADEIAS ACOPLADAS ANTIFERROMAGNÉTICAS DE HEISENBERG.

PARREIRA, J. R.; BOLINA, O.; PEREZ, J. F.
USP

Nesta comunicação, apresentamos um estudo sobre cadeias antiferromagnéticas de spins quânticos semi-inteiros acopladas antiferromagneticamente com interações de longo alcance. Mostramos a ausência de

gap entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados, no caso de ser suficientemente rápido o decaimento das interações. A seguir, analisamos um antigo resultado de Lieb, Schultz e Mattis acerca da ausência de gap em um sistema de várias cadeias acopladas com interação de vizinhos mais próximos. Discutimos a dependência desse resultado para com a paridade do número de cadeias envolvidas e comentamos um cálculo numérico recente de Barnes et al. que parece confirmar tal comportamento. Por fim, citaremos alguns resultados relacionados com a conjectura de Haldane.

LOCALIZATION AND DELOCALIZATION IN FUSE MODEL

ZHANG, S. Z.
CIFMC, UnB
HANSEN, A.

Inst. for Fysikk, NTH, N-7034, Trondheim, Norway

Using the roughness $W = (\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2)^{1/2}$, we investigate the relations between the configuration of the cracks in the system and the distribution function $t^{1/D} (-\infty \leq D \leq \infty)$ of the threshold in the fuse model. Where y is the coordinate of the cracks. It is found that the system can be separated into three categories: weak fuse systems, hard fuse systems and the ones between these two corresponding to $D \geq 0$, $D \leq -2.5$ and $-2.5 \leq D \leq 0$ respectively. The cracks are localized in the last category systems, but, delocalized in the other systems. The localized and delocalized here means intuitively that all of the microcracks are near the final crack, which separates the system into two parts, or are scattered over everywhere in the system. The critical values of D separating these categories were estimated with the hard and weak fuse concept at $D = 0$ and $D = -2.3$, these values are very close to the simulation results. It is also found that the scaling behavior of the characteristic of the systems belonging to different category is quite different.

UNIVERSALITY AND NON UNIVERSALITY IN FUSE MODEL

ZHANG, S. Z.
CIFMC, UnB
HANSEN, A.

Inst. for Fysikk, NTH, N-703, Trondheim, Norway

By means of the fuse model and the distribution function t^{Φ_0} ($1 \leq t \leq \infty$) of the threshold, we investigated the relations between α , β and γ , the scaling exponents of the current I_c , voltage V_c and the number of the burned fuses n during the whole breakdown process, which are defined by the relations $G(I_c/L^\alpha) = F(V_c/L^\beta) = H(n/L^\gamma)$. It is found that the α , β are very insensitive to the choice of Φ_0 and

Φ_∞ , ie. nearly a constant, in a very large range of the Φ_0, Φ_∞ space. This is consistent with the universality conjecture. However, when $\Phi_0 \leq 0.2$ or $\Phi_\infty \leq 0.5$, both α and β become very sensitive and it can't be expected that there is a universal behavior in these ranges. The value of γ decreases with the increase of Φ_∞ but almost independent of Φ_∞ except that when Φ_∞ gets very little, say 0.25. An approximate relation between γ and Φ_0 was obtained on the basis of the dilute analysis, and a phase diagram of α, β and γ on the space Φ_0, Φ_∞ is also given, which is consistent with the recent theoretical analyses using the concept of scale-invariant disorder in the ranges A, B, and C, but not in D defined by one of the authors (Alex, Hansen).

COMPORTAMENTO CRÍTICO DA MAGNETIZAÇÃO DE SUPERFÍCIE DO MODELO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO.

MORAES, J. N. B. DE; FIGUEIREDO, W.
UFSC

Através do método das funções de Green determinamos o diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico em uma rede semi-infinita. Na superfície do modelo consideramos um modelo de Heisenberg isotrópico, enquanto que no volume do sistema tomamos um modelo de Heisenberg anisotrópico, cujo parâmetro de anisotropia permite considerarmos desde um modelo de Ising até um modelo de Heisenberg isotrópico. Mostramos que o diagrama de fases no plano acoplamento de superfície versus parâmetro de anisotropia apresenta um ponto de mínimo. Esse comportamento também já foi observado em cálculos através do grupo de renormalização no espaço real. Calculamos também a derivada da magnetização de superfície na temperatura crítica de volume do sistema e mostramos que na aproximação das fases aleatórias ela apresenta uma descontinuidade. O gráfico dessa derivada em função do parâmetro de anisotropia também apresenta um ponto de mínimo e diverge na linha crítica.

ESTUDO DE CADEIAS QUÂNTICAS COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS ATRAVÉS DE UMA TÉCNICA DE MONTE CARLO VARIACIONAL.

CARNEIRO, C. E. I.; OLIVEIRA, M. J. DE;
WRESZINSKI, W. F.
USP

Estudamos as propriedades, a temperatura zero, de uma cadeia de spins 1/2, com interações competitivas,

descrita pela hamiltoniana

$$H = -J_1 \sum_{i=1}^N [S_i^x S_{i+1}^x + \Delta(S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z)] \\ + J_2 \sum_{i=1}^N [S_i^x S_{i+2}^x + \Delta(S_i^y S_{i+2}^y + S_i^z S_{i+2}^z)] \quad ,$$

onde os S^α são proporcionais às matrizes de Pauli. Tomando J_1 e $J_2 > 0$ o modelo apresenta interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e antiferromagnéticas entre segundos vizinhos. A competição entre as duas interações é controlada pelo parâmetro $p = J_2/J_1$. A anisotropia está associada ao parâmetro Δ . Apesar de unidimensional o modelo não é exatamente solúvel. Adaptamos para este sistema uma técnica de Monte Carlo, desenvolvida por Huse e Elser, que permite obter uma aproximação variacional para a função de onda do estado fundamental. Esta técnica foi primeiramente empregada no estudo do estado fundamental de antiferromagnetos em redes bipartidas. Neste caso existe um resultado rigoroso, devido a Marshall e Peierls, sobre a fase da função de onda que serve como guia na construção da função variacional. Mostramos neste trabalho que uma fase análoga parece ser o ingrediente fundamental da função de onda do estado fundamental da cadeia quântica. Os resultados que obtivemos permitem esboçar um diagrama de fases consistente com resultados obtidos por outros métodos.

TRANSIÇÃO DE FASE NO MODELO SPIN-BÓSON COM CAOS A TEMPERATURA FINITA.

CAMARGO, F.; FURUYA, K.
IFGW-UNICAMP
NEMES, M. C.
Depto. de Física - UFMG

O modelo de interação spin-bóson do Maser de Dicke generalizado (sem ser na "rotating wave approximation"), descreve a interação de átomos de dois níveis em uma cavidade com um campo de radiação monomodo. Um tratamento variacional na aproximação de campo médio realizado por A. H. Blin, B. Hiller, M. C. Nemes e J. da Providência (J. Phys. A, 25, (1992) 2243) permitiu obter a função de partição e propriedades termodinâmicas do sistema e também como dar uma interpretação simples da transição de fase (superradiante) em termos das estatísticas dos fótons e átomos. Analisamos o comportamento do calor específico com a transição de fase neste modelo. Também a Hamiltoniana clássica (com Caos) pode ser escrita de forma a permitir o estudo do efeito da temperatura na dinâmica clássica. Realizamos então a análise da estabilidade dos pontos fixos das equações dinâmicas com a temperatura, obtendo assim o comportamento das soluções

estáticas das equações de movimento com a temperatura.

TEORIA DE ESCALA DA TRANSIÇÃO VIDRO DE SPIN QUÂNTICA

CONTINENTINO, M. A.

UFF

BOECHAT, B.; SANTOS, R. R. DOS

PUC-Rio

Apresentamos recentemente, o primeiro estudo do vidro de spin de Ising em campo transversal usando grupo de renormalização no espaço real ^a. O diagrama de fases obtido mostra o deslocamento da temperatura crítica (T_c) do sistema com o campo magnético transversal (Γ). O fluxo ao longo da fronteira crítica, em temperatura finita, é em direção ao ponto fixo do vidro de spin clássico, demonstrando que o campo transversal não causa uma mudança de comportamento crítico neste sistema. Mostramos ainda, que existe uma correspondência interessante com os dados experimentais obtidos recentemente para o sistema $\text{LiHo}_{0.167}\text{Y}_{0.833}\text{F}_4$ ^b. Entretanto, o valor encontrado experimentalmente para o expoente γ da susceptibilidade não linear, é muito pequeno quando comparado com o valor conhecido para o sistema clássico. Foi sugerido que esta discrepância deve-se a possibilidade da transição em $T = 0$ ser de primeira ordem ^c. Para elucidar esta questão derivamos a teoria de escala para esta transição. Calculamos os expoentes críticos associados com o ponto fixo de temperatura zero em $(\Gamma/J) = (\Gamma/J)_c$. Nossos resultados indicam que a transição permanece de segunda ordem mesmo em $T = 0$.

^aBeatriz Boechat R R do Santos e M A Continentino, Phys. Rev. B a ser publicado como Rap. Comm.

^bW Wu, D Bitko, T F Rosenbaum, and G Aeppli, Phys. Rev. Lett. 71, 1919 (1993)

^cW Wu, D Bitko, T F Rosenbaum, and G Aeppli, Phys. Rev. Lett. 71, 1919 (1993)

CÁLCULO NUMÉRICO SIMPLES DAS FUNÇÕES ELÍPTICAS JACOBIANAS

VASCONCELOS, D. S. DE; RIBEIRO FILHO, A.

UFBA

Com o grande avanço apresentado pelos estudos em torno da Física Não Linear, o que se denota é a presença de inúmeras e complexas expressões envolvendo as Funções Elípticas Jacobianas, em diferentes áreas. O objetivo do presente trabalho é apresentar algumas rotinas em FORTRAN, que, baseadas no algoritmo de Bulirsch, calculam eficientemente as doze funções jacobianas Sn , Cn , Dn , Sc , Sd , Cd , Cs , Ds , Dc , Ns , Nc , Nd . Consegue-se calculá-las para diferentes valores do módulo k , e do parâmetro u , comparando-os com os das tabelas internacionais padrão. Um levantamento bibliográfico em torno dos cálculos numéricos dessas funções

foi realizado. Ref. A.Ribeiro Filho e D.S. de Vasconcelos, in: Matemática Univ. vol. 15 (1993), 20-32.

Diagrama de Fase no Modelo Heisenberg de Spin-1/2 Anisotrópico na Rede Quadrada Antiferromagnética

SOUSA, J. R. DE; FITTIPALDI, I. P.

UFPE

PLASCAK, J. A.

UFMG

Várias são as técnicas utilizadas para estudar o antiferromagnetismo do modelo de Heisenberg de spin-1/2 numa rede quadrada. Isto se deve, porque este modelo tem sido usado para explicar o antiferromagnetismo do cristal La_2CuO_4 . Recentemente, este modelo tem sido tratado em redes duais[1] na presença de anisotropia no exchange, onde o diagrama de fase no plano (T_N, Δ) foi analisado na rede quadrada (Δ é o parâmetro de anisotropia) A curva $T_N(\Delta)$ apresenta um comportamento reentrante em torno de um dado valor crítico de Δ_c , na qual $T_N(\Delta_c) = 0$. Este comportamento reentrante é bem distinto do caso ferromagnético[2], onde $T_N(\Delta)$ tende a zero de forma logarítmica. Neste trabalho, estudaremos o modelo descrito acima pelo método de grupo de renormalização na aproximação de campo médio (MFRG) com clusters de dois ($N=2$) e quatro ($N'=4$) spins. O MFRG foi aplicado no caso ferromagnético por Plascak[3], e o comportamento da curva $T_N(\Delta)$ é similar ao resultado da Ref.2. O objetivo deste trabalho, é investigar a existência do comportamento reentrante no diagrama de fase (T_N, Δ) observado por de Souza[1], e também comparar com o caso ferromagnético[3].

[1] A. M. C. de Souza, Phys. Rev. B48, 3744 (1993).

[2] A. O. Caride et al., Phys. Rev. Lett. 51, 145 (1983).

[3] J. A. Plascak, J. Phys. A17, L597 (1984).

SPECIFIC HEAT OF A SINGLE QUANTUM ANHARMONIC ONE-DIMENSIONAL OSCILLATOR †

GONÇALVES, L. L.; MATOS, J. M. O.

UFCE

The internal energy and the specific heat of a one-dimensional quantum anharmonic oscillator associated to the potential $V(x) = ax^2 + bx^{2p}$ for $p=2,3,4$ is considered. The low temperature results are obtained numerically by using the low quantum number eigenvalues determined, in high precision, by Matos and Gonçalves[1]. In the high temperature region the results are determined, also in high precision, by applying a higher order WKB method developed by Bender et al.[2], and Kersawani and Varshni[3], for $p=2$. A numerical match is made between the solutions obtained

by the two different methods so that the results can be extended to the entire range of temperature. The explicit results are compared to the ones obtained by Mariz and Tsallis[4] by using an approximate analytic method.

[1] J.M.O.Matos and L. L. Gonçalves, *Braz. J. Phys.* 24, (...) (1994)

[2] C. M. Bender, K. Olaussen and P. S. Wang, *Phys. Rev. D* 16, 1740 (1977)

[3] R. N. Kesarwani and Y. P. Varshni, *J. Math. Phys.* 23, 803 (1982)

[4] A. M. Mariz, *Phys. Rev. A* 29, 2871 (1984)

†Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq and Finep.

Propriedades Críticas de Modelos Integráveis de Spin Misto.

ALADIM, S. R.; MARTINS, M. J.

Dep. Física, Universidade Federal de São Carlos

Estamos estudando as propriedades críticas de cadeias de spin misto. Este sistema é uma generalização dos modelos homogêneos de spin já conhecidos como XXX e XXZ . São construídos alternado-se sítios que se transformam de acordo com representações diferentes do grupo $SU(2)$ (ou outro grupo de Lie semi-simples). Este modelo é integrável no sentido de possuir número infinito de cargas conservadas. Usando-se o método de espalhamento inverso (Bethe Ansatz Algébrico) podemos diagonalizar tais sistemas. Determinamos a classe de universalidade das cadeias de spin misto com simetria $SU(2)$ [1]. A carga central da generalização destes modelos mistos para sítios com simetria interna $GL(N)$ [2] também foi calculada. Usando uma relação entre as matrizes R em um dado valor de "rapidity" determinamos de forma fechada a expressão destes hamiltonianos de spins misto.

[1] *Critical Behaviour of Mixed Spin Chains* S.R.Aladim, M.J.Martins *J.Phys. A* 26, (1993) L529 [2] *Class of universality of integrable and isotropic $GL(N)$ mixed magnets.*

S.R.Aladim, M.J.Martins, *J Phys. A* 26, *Math. Gen.* (1993) 7287.

ESTUDO DO ESTADO FUNDAMENTAL DE CADEIAS ANTIFERROMAGNETICAS DE HEISENBERG, COM SPIN-1

NEIROTTI, J. P.; OLIVEIRA, M. J. DE

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Estudam-se os níveis fundamental e o primeiro excitado de cadeias de Heisenberg de spins 1 usando uma generalização do método de Monte Carlo desenvolvido por M. J. de Oliveira. Calculando o valor do gap de

energia no limite termodinâmico, constróem-se diagramas de fases unidimensionais, variando o parâmetro do campo cristalino e o parâmetro de anisotropia na componente z . Tratam-se de reproduzir os resultados obtidos por S. T. Chui (*Phys. Rev. B* 3 29(1984)1287 – 1291) e V. Glause T. Schneider (*Phys.Rev.B* 130(1984) 215-225) a modo de testes do programa. Espera-se, deste modo, dar uma prova numérica mais completa da conjectura de Haldane (*Phys. Lett. A* 93(1983)464 – 468 e *Phys.Rev.Lett.* 1550(1983) 1153-1156). As cadeias com as quais se trabalha têm de quatro a cinquenta spins obtendo-se o valor do gap no limite por métodos de extrapolação.

CÁLCULO DE MONTE CARLO PARA O ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG QUÂNTICO ESPACIALMENTE ANISOTRÓPICO.

SAUERWEIN, R. A.; OLIVEIRA, M. J. DE

Instituto de Física da Univ. de São Paulo

As propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2 espacialmente anisotrópico são investigadas através de um método de Monte Carlo. A anisotropia deste modelo é introduzida no modelo de Heisenberg usual através de acoplamentos antiferromagnéticos de troca dependentes da direção em que se situam os pares de vizinhos mais próximos. O comportamento da magnetização "staggered" e da energia do estado fundamental são obtidas em função do parâmetro de acoplamento interdimensional em simulações em redes quadradas de L^2 spins ($L = 4, 6, 8$ e 10) e redes cúbicas de L^3 spins ($L = 4, 6$ e 8) para os três casos possíveis. (a) No acoplamento bidimensional entre cadeias de spin, observamos uma transição ordem-desordem para uma anisotropia $J_y/J_x < 0.2$, resultado este que está de acordo com valores disponíveis na literatura. (b) No acoplamento tridimensional entre cadeias spins, entretanto, nossos resultados não indicam esta transição, o que contraria outros resultados da literatura. (c) Finalmente no acoplamento tridimensional entre planos de spins, observamos um crescimento acentuado da magnetização "staggered" para parâmetros de acoplamento interplanar $J_z/J_{xy} < 0.1$, seguido de um crescimento suave até os valores obtidos para o caso do modelo de Heisenberg tridimensional isotrópico, também calculados.

**EFEITOS DE CAMPOS MAGNÉTICOS
SOBRE O DIAGRAMA DE FASE DA
CADEIA QUÂNTICA XXZ SPIN 1/2**

MALVEZZI, A. L.; ALCARAZ, F. C.
Dept. Física - UFSCar

Estudamos o diagrama de fase da Hamiltoniana

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \left[\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + 2 \left(h + (-1)^i h_{stg} \right) \sigma_i^z \right];$$

onde σ_i^x, σ_i^y e σ_i^z são matrizes de Pauli atuando no sítio i da cadeia de tamanho M sob condições periódicas de contorno. A anisotropia Δ e os campos h e h_{stg} são parâmetros reais. Se o campo magnético alternado ("staggered") h_{stg} é nulo, temos H integrável e seu diagrama de fase é conhecido. Se $\Delta = 0$ então H é fermionizável numa forma quadrática, possuindo assim solução analítica. Vemos então uma competição entre h e h_{stg} com o surgimento de fases massivas ferro e anti-ferromagnéticas separadas por uma região não-massiva. Se $\Delta = h = h_{stg} = 0$ então H é crítico, mas qualquer h_{stg} não nulo produz uma fase massiva. A forma analítica obtida para as excitações de massa neste caso nos indica o operador primário de dimensão $x = \frac{\pi}{2(\pi-\gamma)}$ (onde $\Delta = -\cos \gamma$) como o perturbador da criticalidade. Na presença de todos os parâmetros perdemos a forma quadrática em férmions. No entanto o Finite-Size-Scaling nos permite estudar o diagrama de fase. Em especial, se $h = 0$ temos novamente regiões massivas separadas por uma fase crítica. Esta fase crítica surge para $\gamma > \frac{3\pi}{4}$, região onde o operador x torna-se irrelevante. O espectro foi obtido computacionalmente para redes de até 20 sítios via algoritmo de Lanczos. Todas as fases críticas encontradas são invariantes conformes e quantidades relevantes associadas a esta simetria tais como carga central e algumas dimensões de operadores primários da teoria foram calculadas seja analiticamente em $\Delta = 0$ ou numericamente em geral. Combinando os diagramas de fase obtidos para os casos particulares acima descritos, obtivemos a superfície de fase nos três parâmetros de H .

**COMPORTAMENTO TETRACRÍTICO
NUMA CADEIA QUÂNTICA DE SPIN 3/2**

MALVEZZI, A. L.
Dept. Física - UFSCar

Recentemente foi proposta na literatura uma família de Hamiltonianas e conjecturou-se que, em certos pontos multicríticos especiais, esses modelos seriam realizações da série minimal da Invariância Conforme. No caso de

spin $S = 3/2$ a Hamiltoniana proposta é

$$H = - \sum_{i=1}^M \left[S_i^z S_{i+1}^z - (1 + a_2) (S_i^z)^2 - \gamma S_i^x \right];$$

onde S_i^z e S_i^x são geradores $SU(2)$ atuando no sítio i de uma cadeia de M sítios sob condições periódicas de contorno e espera-se um ponto tetracrítico com carga central $c = 4/5$ localizado no encontro de duas linhas de transição de fase de segunda ordem com uma linha de primeira ordem no espaço dos parâmetros a_2 e γ . Em nosso trabalho estudamos H através de Finite-Size-Scaling e das previsões da Invariância Conforme para sistemas finitos e confirmamos parte do diagrama de fase e a classe de universalidade do ponto tetracrítico previstos acima. Utilizando o algoritmo de Lanczos combinado com as simetrias de translação e paridade de H , obtivemos o espectro para redes de até 11 sítios. A partir dessas energias estimamos as linhas de segunda ordem e o ponto tetracrítico, assim como a carga central e a dimensão de dois operadores primários da teoria nesse ponto.

**QUANTUM FLUCTUATIONS IN THE
ISING MODEL IN THE TRANSVERSE
FIELD**

KOKSHENEV, V. B.

Universidade Federal de Ouro Preto

NEMES, M. C.; KIM, J. I.

Universidade Federal de Minas Gerais

The recent investigations of the low frequency dynamics of KDP and TGS crystals [1] stimulated a new interest to the intrinsic and thermal diffusion mechanisms of the central peak in the systems undergoing the soft-mode-type phase transitions. The mean-field dynamic analysis of the pseudo-spin model for order-disorder systems (Ising model in the transverse field) within the improved MFA is presented. By the method of equations of motion it is shown that the soft mode transition (condensation of the transverse pseudo-spin waves) can be driven by the fluctuations of the local molecular fields. These are produced by the quantum tunneling effect. The conditions of the central peak appearance and the effects of non-Debye relaxation caused by the quantum fluctuations are discussed. Financial support: FAPEMIG, CNPq

[1] A.S.Chaves, F.V.Letelier, J.F.Sampaio and R.Gazzinelli, Phys. Rev.B, 47, 4880 (1993)

Fenômenos Críticos e Teoria Estatística Geral (EST) - 09/06/94

CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE DE HELMHOLTZ USANDO FUNÇÕES DE GREEN APROXIMADAS.

FIGUEIRA, M. S.

Universidade Federal Fluminense

FOGLIO, M. E.

Universidade Estadual de Campinas

Usamos funções de Green aproximadas (FG) no ensemble gran canônico para obter a energia livre de Helmholtz F por dois métodos diferentes. Este estudo foi motivado pelo cálculo, a partir de FG aproximadas de um elétron, do número total de elétrons N_t como função do potencial químico μ no modelo da rede de Anderson. A baixa T e para certos intervalos dos parâmetros do modelo, obtivemos três valores de μ para cada valor de N_t num pequeno intervalo de N_t . Um destes três estados é termodinamicamente instável pois N_t decresce quando μ cresce, porém o cálculo de F por um dos métodos usados, baseado numa relação termodinâmica, indica que o correspondente F é o menor para os três estados. O propósito deste trabalho é explicar este paradoxo, e sugerir uma modificação do cálculo que evite este problema. Do ponto de vista geométrico resulta evidente que teremos o paradoxo sempre que o gráfico de N_t vs. μ tenha a forma que discutimos acima, independentemente dos detalhes numéricos do cálculo.

MODELO CINÉTICO PARA O MODELO DE INNNI

BARBOSA, M. C.

UFRGS

VLASILEV, O.; DAWSON, K.

Univ. College of Dublin

Introduzimos um modelo cinético para modelo Ising com interações competitivas isotrópicas. Sistemas com interações competitivas, além de apresentarem fases ferro e para, possuem uma fase modulada. No modelo INNNI a transição entre a fase desordenada e ordenada é de primeira ordem devido a efeitos de flutuações. Com o objetivo de estudar como uma a fase modulada emerge da fase para, introduzimos um modelo para a nucleação e crescimento. No estágio inicial de formação da fase modulada, os efeitos devidos a presença de muitas componentes é desprezível e o crescimento da fase assemelha-se ao que se obtém em modelos usuais. Após esta etapa inicial, a cinética passa a ser determinada por efeitos devidos a presença de muitas componentes.

Transição de molhamento perto de um ponto triplo

SANTA-HELENA, E. L. DE; BARBOSA, M. C.

UFRGS

Estudamos o efeito da presença de uma parede na vizinhança de um ponto triplo. Recentemente foi mostrado que em regiões do diagrama de fases onde diferentes fases se fazem presentes, (regiões próximas a transições de primeira ordem) a presença de um recipiente ou de um substrato gera o aparecimento de um fenômeno denominado de "wetting", ou seja, leva ao aparecimento de uma fase onde se esperaria se encontrar uma outra fase. Próximo a pontos triplos, o diagrama torna-se ainda mais complexo, pois combinações de fases podem se fazer presentes. Partindo de um modelo fenomenológico, estudamos este fenômeno. Usamos basicamente um balanço entre a energia da interação com a parede e a energia do "bulk". Diferentemente dos modelos encontrados na literatura, estudamos os efeitos de uma interação de curto alcance. Introduzimos um modelo contínuo.

O NOVO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MEDIO VIA TEORIA DE CAMPO EFETIVO

COELHO, F. O.; PLASCAK, J. A.

UFMG

O novo grupo de renormalização de campo medio, baseado em idéias de campo medio e escala de tamanho finito, foi recentemente proposto e aplicado com sucesso ao modelo de Ising e ao problema de percolação dirigida, onde os parâmetros de ordem foram obtidos via campo medio usual. Estamos estendendo este novo grupo de renormalização para o caso onde os parâmetros de ordem possam ser calculados segundo a chamada teoria de campo efetivo através da identidade de Callen. Este procedimento está sendo aplicado ao modelo de Ising diluído por ligações considerando-se blocos com um e dois spins. Os resultados se mostram bem melhores que os obtidos anteriormente, mesmo se comparados com outros grupos de renormalização do mesmo calibre.

APROXIMAÇÃO DE CADEIA LINEAR NO MODELO DE BLUME-CAPEL

LARA, D. P.; PLASCAK, J. A.

UFMG

O modelo de Blume-Capel de spin geral, quando estudado pela aproximação de campo medio usual, apresenta pontos tricríticos somente para spins inteiros, sendo que para spins semi-inteiros a transição é sempre de segunda ordem em altas temperaturas. Em ambos os casos, porém, para baixas temperaturas existem transições de primeira ordem e vários pontos críticos

terminais dependendo do valor do spin. Estamos estudando este modelo na aproximação de cadeia linear onde as interações ao longo de linhas são tratadas exatamente e as interações entre as linhas são levadas em conta segundo campo medio. Diagramas de fase qualitativamente idênticos aos anteriores são obtidos para spin 1, 3/2 e 2. Porém, os resultados quantitativos são melhores que os de campo medio usual, além de reproduzir o resultado exato em uma dimensão.

MAGNETIZAÇÃO SÍTIO A SÍTIO PARA UM MODELO DE ISING DE SPINS MISTOS EM UMA REDE HIERÁRQUICA

QUADROS, S. G. DE A.; SALINAS, S. R. DE A.
IFUSP

Efetuamos o cálculo exato das magnetizações sítio a sítio para um modelo de Ising de spins mistos em uma rede hierárquica tipo diamante. O modelo é descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i S_j + D \sum_j S_j^2,$$

onde $\sigma_i = \pm 1$, $S_j = \pm 1, 0$, a primeira soma envolve todos os pares de primeiros vizinhos e a segunda percorre apenas os sítios contendo spins do tipo S . Estamos interessados no caso $J > 0$, que fornece um estado fundamental ferromagnético. Resultados obtidos anteriormente para uma rede de Bravais fornecem um diagrama de fases contendo uma fase ordenada, ferromagnética, e outra paramagnética. A transição entre estas duas fases é de primeira ordem para temperaturas abaixo da temperatura tricrítica t_c . Acima desta temperatura a transição é de segunda ordem. Estes resultados foram obtidos através da técnica de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, que equivale à solução em uma rede hierárquica tipo diamante. O cálculo exato da magnetização em cada sítio, apresentado aqui para uma rede hierárquica, evidencia a existência de um ponto tricrítico, confirmando o diagrama de fases obtido anteriormente. A técnica funciona como mais um critério para decidir a ordem das transições de fase em cálculos de grupo de renormalização no espaço real.

O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO POR ESCALA DE TAMANHOS FINITOS APLICADO AO MODELO DE POTTS COM q ESTADOS

CORDEIRO, C. E.; OLIVEIRA, P. M. C. DE;
OLIVEIRA, S. M. DE
UFF

O Grupo de Renormalização por Escala de Tamanhos Finitos foi introduzido em 1992 (Europhys. Lett. 20, 621) por P.M.C. de Oliveira, e vem sendo utilizado com

sucesso desde então, tendo sido o único Grupo de Renormalização capaz de verificar a mudança de classe de universalidade no problema da diluição quando se passa de duas para tres dimensões (Physica A, 1994), inclusive sem violar o critério de Harris. Uma das principais características deste Grupo está no fato do mesmo ser capaz de descrever todo o espaço de fases, e não apenas as vizinhanças de um ponto crítico. É por isto que resolvemos utilizá-lo para estudar a transição de primeira ordem que ocorre no modelo de Potts para $q = 4$ em $d = 2$. Tal transição, por ser de primeira ordem, apresenta um expoente crítico magnético cujo valor é igual à dimensão do sistema, resultado este que não pode ser verificado pelos Grupos de Renormalização usuais. Um dos únicos resultados de GR sobre esta transição é o trabalho de Nienhuis, Berker e colaboradores de 1979 (Phys. Rev. Lett. 43, 737), onde se inclui uma diluição artificial considerando células de spins desordenados como vacâncias.

UM MODELO UNIDIMENSIONAL DE SPINS COM FASES MODULADAS

BARBOSA FILHO, F. F.
Dep. de Física - Univ. Federal do Piauí, CAPES-PICD
YOKOI, C. S. O.
Instituto de Física - USP

Estudamos o estado fundamental de um modelo unidimensional de spins $S \geq 1/2$ descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N (-J_1 S_i S_{i+1} - J_2 S_i S_{i+2} + D S_i^2),$$

onde $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ e $D > 0$, através da técnica dos potenciais efetivos (R. B. Griffiths and W. Chou, Phys. Rev. B 34, 6219, 1986). Levantamos os diagramas de fases no plano $D-p$, $p = -J_2/J_1$, para diversos valores de S . Da análise destes diagramas verificamos que o modelo exhibe fases moduladas em certas regiões do diagrama de fases, bem como fases que assemelham-se às fases ferromagnéticas e paramagnéticas do modelo ANNNI. À medida que o valor do spin S aumenta, os diagramas de fases ganham em complexidade e assemelham-se aos diagramas do modelo ANNNI na aproximação de campo médio (W. Selke e P. M. Duxbury, Z. Physik B 57, 49, 1984).

THE FLUCTUATION-DISSIPATION THEOREM IN THE FRAMEWORK OF THE TSALLIS STATISTICS.

CHAME, A. M. N.; MELLO, E. V. L. DE
Universidade Federal Fluminense

In the framework of a generalized statistical mechanics recently introduced ^a, we derive a generalized form of the Fluctuation-Dissipation theorem, which expresses

a relation between extended susceptibilities and equilibrium fluctuations. To achieve this, we consistently propose a generalized functional form for the instantaneous distribution function. The present theorem successfully reproduced, as particular cases, the fluctuation forms of the specific heat and of the magnetic susceptibility, already proved elsewhere^b through completely different arguments.

^aC. Tsallis, J. Stat. Phys. 52,479 (1988)

^bE.P. da Silva, C. Tsallis and E.M.F. Curado, Physica A 199,137 (1993); C. Tsallis, "Extensive Versus Nonextensive Physics", in "Magnetism, Magnetic Materials and Their Applications", ed. J.L. Morán- Lopez and J.M. Sanchez (Plenum, 1993)

CALOR ESPECÍFICO GENERALIZADO DO ROTOR RÍGIDO ANISOTRÓPICO

CURILEF, S.; TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O espectro de energia de poucos sistemas quânticos é conhecido exatamente. Entre estes sistemas está o rotor rígido anisotrópico (oblato e prolato). O calor específico dele já foi estudado numericamente em outro trabalho. Uma generalização da estatística de Boltzmann-Gibbs tem sido proposta para sistemas não extensivos e a conexão dela com a termodinâmica foi também estabelecida. Esta generalização está baseada em uma entropia $S_q \equiv k(1 - \sum_i p_i^q)/(q - 1)$, ($q \in \mathbb{R}$) que recupera, no limite $q \rightarrow 1$, a forma comum $-k_B \sum_i p_i \ln p_i$. Estudamos, em este trabalho, para q arbitrário, o comportamento clássico e quântico do calor específico de um rotor rígido anisotrópico. Os resultados são apresentados para valores típicos do momento de inércia e em todos os casos verificamos que os resultados tradicionais, da estatística de Boltzmann-Gibbs, são obtidos como um caso especial da estatística generalizada. No caso $q=1$ oblato observamos convergência não uniforme, isto permite-nos resolver um *paradoxo* que perturbou profundamente a J. W. Gibbs. Finalmente, fazemos uma extensão da fórmula de Hilhorst para o conjunto grand-canônico.

Modelo de spin- S na rede de Bethe

TAMASHIRO, M.; SALINAS, S.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Apresentamos uma formulação exata, na forma de um mapa discreto não-linear de dimensão $2S$, de um modelo definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2,$$

onde $S_i = S, S-1, \dots, -S+1, -S$ e as duas primeiras somas são sobre os primeiros vizinhos em uma árvore

de Cayley de coordenação z . Analisamos em detalhe o caso típico de spin semi-inteiro $S = 3/2$, sem a presença de interações biquadráticas ($K = 0$). Encontramos um ponto fixo paramagnético estável em altas temperaturas e uma região de estabilidade, em baixas temperaturas, de dois pontos fixos ferromagnéticos distintos. Além desses atratores usuais, detectamos a presença de muitos outros ramos instáveis, que, no entanto, são irrelevantes para o comportamento termodinâmico. No limite de coordenação infinita da árvore, o problema é simplificado e recuperamos os resultados de uma aproximação de campo médio¹. Para $S = 3/2$, sem a presença de campo cristalino ($D = 0$), confirmamos a existência de uma fase ferrimagnética² para valores finitos de coordenação da árvore e analisamos a ocorrência de fronteiras reentrantes no interior da região ordenada. Para o caso típico de spin inteiro $S = 2$, sem interações biquadráticas, mostramos a separação da fronteira paramagnética de primeira ordem, em concordância com cálculos de campo médio¹. Confirmamos também a existência de uma fase ferrimagnética no caso de spin-1 para interações biquadráticas negativas³.

1 J. A. Plascak, J. G. Moreira e F. C. Sá Barreto, *Phys. Lett. A* 173, 360 (1993).

2 F. C. Sá Barreto e O. F. de Alcântara Bonfim, *Physica A* 172, 378 (1991).

3 W. Hoston e A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* 67, 1027 (1991).

MAGNETIZAÇÃO DE SUPERFÍCIE PARA O FERROMAGNETO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO SEMI-INFINITO.

BRANCO, N. DA S.

Universidade Federal de Santa Catarina

CHAME, A. M. N.

Universidade Federal Fluminense

Obtem-se o parâmetro de ordem de volume e de superfície (em função da temperatura) do ferromagneto de Heisenberg (spin 1/2) anisotrópico, dado pela Hamiltoniana

$$-\beta H = \sum_{\langle i,j \rangle} K((1 - \Delta)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z)$$

em uma rede semi-infinita. A constante de acoplamento K e a anisotropia Δ podem ter valores diferentes na superfície e no volume. Para este cálculo usamos técnicas de Grupo de Renormalização no Espaço Real. Estamos observando a mudança de comportamento da magnetização (de Heisenberg isotrópico para o de Ising), com maior ênfase na análise da transição extraordinária, que já foi bastante estudada no caso de Ising, devido a uma controvérsia sobre a continuidade da primeira derivada da magnetização de superfície neste ponto^a.

^aA. Chame e C. Tsallis, J. Phys.:Cond. Matt. 1, 10129 (1989); D.P. Landau e K. Binder, Phys.Rev.B 41,4786 (1990); Diehl e Smock, Phys.Rev. B 47, 5841 (1993)

**FRONTEIRA DE FASE PARAMAGNÉTICA
DE UM ANTIFERROMAGNETO
ANISOTRÓPICO EM BAIXAS
TEMPERATURAS**

ARRUDA, A. S. DE

Dep. de Matemática - UFMT

FIGUEIREDO, W.

Dep. de Física - UFSC

ARRUDA, A. S. DE; MAJLIS, N.; SELZER, S.

Inst. de Física - UFF

Estudamos a fronteira de fases de um antiferromagneto entre as fases Paramagnética e Spin-Flop, através de expansões em baixas temperaturas. Obtemos as expressões para o campo crítico (H_c) e para a magnetização ($\langle S^z \rangle$) em função da temperatura. Consideramos um antiferromagneto com spins $S = 1$ em um campo magnético uniforme e em baixas temperaturas. Para grandes valores do campo magnético, o antiferromagneto se encontra na fase paramagnética e pode ser representado pela hamiltoniana de Heisenberg acrescida dos termos de Zeeman e da anisotropia de íon único, sendo a constante de troca negativa ($J < 0$). Na solução deste problema, utilizamos o formalismo das funções de Green. O desacoplamento das funções de Green de ordem superior é feita através da aproximação das fases aleatória (RPA), para as interações de troca (J). Para o termo de anisotropia de íon único utilizamos o método de Devlin que consiste em escrever uma outra equação de movimento para este termo e resolver exatamente o sistema de equações. A dependência do campo crítico com a temperatura difere da obtida por Anderson e Callen relativamente ao termo de anisotropia. Comparamos os diferentes desacoplamentos existentes e aplicamos os resultados obtidos para o antiferromagneto uniaxial $NiCl_2 \cdot 6H_2O$.

Simulações de Monte Carlo para o Modelo de Blume-Capel

TSAI, S. H.; SALINAS, S. R. A.

Universidade de São Paulo

Realizamos um conjunto de simulações de Monte Carlo para o modelo de Blume-Capel, definido pelo hamiltoniano de spin

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2, \quad ,$$

onde $S_i = +1, 0, -1$, $J > 0$, $D > 0$, e a primeira soma é sobre os vizinhos mais próximos de uma rede cúbica simples. O nosso principal objetivo consiste em desenvolver algoritmos confiáveis para distinguir entre transições de primeira e segunda ordem, tendo em vista a consideração de modelos mais complexos. Utilizamos o método dos cumulantes (K.Binder, Phys.Rev.Lett. 47, 693(1981)) para caracterizar a ordem das transições

no modelo de Blume-Capel. Para calcular os cumulantes empregamos o método de histogramas proposto por Ferrenberg e Swendsen (A.M.Ferrenberg e R.II.Swendsen, Phys.Rev.Lett. 61, 2635(1988)). Este método consiste em construir histogramas da energia do sistema. Estes histogramas são proporcionais às distribuições de probabilidade da energia e podem ser utilizados para determinar médias de grandezas termodinâmicas. É interessante utilizar este método uma vez que ele nos permite calcular grandezas termodinâmicas como funções contínuas dos parâmetros do sistema.

**ESTUDO DA LINHA CRÍTICA DO
MODELO DE BLUME-CAPEL ATRAVÉS DE
ALGORITMOS DE CLUSTER.**

BOUABCI, M. B.; CARNEIRO, C. E. I.

USP

O Modelo de Blume-Capel, descrito pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2, \quad ,$$

onde $S_i = +1, 0, -1$ e a primeira somatória é sobre primeiros vizinhos, é estudado através de simulações de Monte Carlo. Para realizarmos as simulações utilizamos algoritmos de cluster, inicialmente formulados por Swendsen-Wang para o Modelo de Potts, e aqui generalizados para o estudo deste modelo. A abordagem através de algoritmos de cluster oferece diversas vantagens. Uma delas diz respeito ao estudo de transições de 2ª ordem, onde a divergência do comprimento de correlação espacial ξ provoca um aumento do tempo de decorrelação τ entre as configurações geradas pelo algoritmo. O tempo de decorrelação obedece a lei de escala $\tau \sim L^z$, onde L é a dimensão linear da rede e z é o chamado expoente crítico dinâmico. Quando utilizamos o algoritmo de Metropolis, as mudanças que ocorrem na rede propagam-se por difusão, e $z \sim 2.1$. Algoritmos de cluster efetuam mudanças não locais na rede, ocasionando expoentes críticos dinâmicos menores. Para o algoritmo de cluster proposto encontramos $z \sim 0.43$. A diminuição do tempo de decorrelação torna possível a obtenção de dados bastante precisos, o que nos possibilitou um estudo detalhado dos expoentes críticos ao longo de toda a linha crítica. Particular atenção é dada a tentativa de caracterizarmos a linha de transição de 2ª ordem através de propriedades dos clusters gerados pelo algoritmo.

ESTUDO DE UM MODELO METAMAGNÉTICO COMPRESSÍVEL NA APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO.

MOREIRA, A. F. DA S.; HENRIQUES, V. B.

Universidade de São Paulo

Compostos como $Ni(NO_3)_2 \cdot H_2O$ apresentam um diagrama de fases que sugere um comportamento antiferromagnético com forte anisotropia uniaxial. Medidas de calor específico e susceptibilidade indicam que o material se constitui de planos ferromagnéticos acoplados antiferromagneticamente. Estes compostos tem sido estudados experimentalmente sob aplicação de pressão hidrostática. Buscando compreender os comportamentos crítico e multicrítico deste tipo de material, estudamos um modelo de Ising antiferromagnético compressível. A compressibilidade é introduzida no modelo através das constantes de troca dependentes do volume, $J = J_0 + j(a - a_0)$, onde a é a distância média entre spins. Desta forma, o modelo deve verificar o efeito de cisalhamento, despresado em tratamentos anteriores. No ensemble das pressões, obtém-se o hamiltoniano efetivo de spins. Num tratamento tipo Curie-Weiss calcula-se a energia livre, tanto no ensemble canônico, quanto no ensemble das pressões. Faz-se uma expansão de Landau que fornece a linha crítica de segunda ordem e o ponto tricrítico, em função da pressão. O comportamento analítico do modelo é confrontado com o comportamento do modelo sem cisalhamento e com os dados experimentais.

MODELO DE SPINS PARA O ESTUDO DAS FASES NEMÁTICAS DE UM CRISTAL LÍQUIDO MICELAR - EFEITO DA POLIDISPERSIVIDADE

HENRIQUES, E. F.; HENRIQUES, V. B.

IFUSP

Estudamos o estado fundamental de um modelo de spin 1 que representa uma solução de micelas uniaxiais interagentes com uma distribuição de tamanhos. Usamos acoplamentos dados por uma distribuição gaussiana de tamanhos dessas micelas em uma abordagem de campo médio. Comparamos nossos resultados com os obtidos por Vera B. Henriques, L.Q. Amaral e Mário J. Oliveira (resultados não publicados), que utilizaram uma distribuição do tipo delta, representando micelas em forma de discos ou bastões. O estudo completo do problema usando esta distribuição delta prevê a presença de uma fase nemática biaxial separando, por duas linhas críticas, duas fases uniaxiais (caracterizadas por sinais opostos na parte anisotrópica da susceptibilidade diamagnética), além da linha de coexistência separando a região com as fases nemáticas da região isotrópica, sobre a qual há um ponto de Landau onde terminam as linhas críticas acima citadas.

TRANSIÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO EM SISTEMAS DE LINHAS

SILVA, I. P. C. E; MORAES, F.

Depto. de Física - UFPE

Em nosso trabalho, apresentamos uma análise da transição tipo sólido líquido em sistemas compostos por objetos lineares extensos (linhas). Mostramos que essa transição pode ser compreendida como uma passagem para um espaço de curvatura escalar negativa e constante k , e que esta é associada com o parâmetro de desordem do sistema ($k=0$ na fase sólida, ou ordenada, e $k \neq 0$ na fase líquida). Obtemos a temperatura de transição T_m como uma função do potencial entre linhas e das energias de curvatura e torção intrínsecas das linhas, e analisamos o sistema na transição. Resultados preliminares indicam uma não dependência da métrica nos parâmetros da transição.

TRANSIÇÕES DE FASE EM MONOCAMADAS ANFIFÍLICAS: ISOTERMAS NO MÉTODO VARIACIONAL SOBRE "CLUSTERS".

BUZANO, C.

Politecnico di Torino

EVANGELISTA, L. R.

DFI-UEM

A transição de fase líquido-expandido (LE)-líquido-condensado (LC) é uma das muitas transições de fase que ocorrem em monocamadas de moléculas anfifílicas simples na interface ar-água. A origem dessas camadas monomoleculares pode ser entendida considerando-se que essas moléculas apresentam, geralmente, uma extremidade hidrofóbica (uma cadeia hidrocarbônica) e outra extremidade hidrofílica. A técnica experimental mais comumente utilizada para investigar essas fases é o estudo das isotermas no plano pressão superficial-área molecular. Neste trabalho investigamos a transição de fase LE-LC na aproximação de par do Método Variacional sobre "Clusters". O modelo analisado (J. L. Firpo, J. P. Legré, A. G. Bois e J. F. Baret, *J. Chim. Phys.* 81, 113, 1984) pode ser mapeado no modelo de Blume-Emery-Griffiths. Os indícios da transição são buscados nos picos das isotermas. Os resultados obtidos na aproximação de par mostram um melhor acordo com os dados experimentais que aqueles obtidos na aproximação de Bragg-Williams, para um conjunto de valores típicos dos parâmetros energéticos e entrópicos, no caso do ácido pentadecanoico. Esses resultados indicam que a transição LE-LC é fracamente de primeira ordem, concordando com experimentos realizados recentemente em sistemas anfifílicos cuidadosamente purificados.

DIAGRAMA DE FASES DO MODELO DE FRENKEL-KONTOROVA "DISCRETO".

ALVES JUNIOR, N.; YOKOI, C. S. O.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Estudamos um modelo unidimensional de partículas ligadas por molas e submetidas a um potencial senoidal, conhecido como modelo de Frenkel-Kontorova. A energia potencial do sistema é dada por:

$$\mathcal{E} = \sum_n \left[\frac{1}{2} (u_n - u_{n-1} - \gamma)^2 + \frac{K}{(2\pi)^2} (1 - \cos 2\pi u_n) \right],$$

onde u_n indica a posição da partícula, γ é o fator de desajuste e K é a amplitude do potencial.

Consideramos a situação em que as partículas só podem ocupar posições discretas numa rede. Levantamos diversos diagramas de fases para diferentes discretizações utilizando o método do potencial efetivo.

O modelo de Ashkin-Teller anisotrópico em uma rede hierárquica

BEZERRA, C. G.; MARIZ, A. M.

UFRN

As propriedades críticas (diagrama de fases e classes de universalidade) do modelo de Ashkin-Teller anisotrópico ferromagnético em uma rede hierárquica, são analisadas por meio do método do grupo de renormalização no espaço real. Este modelo é caracterizado pelo Hamiltoniano

$$H = - \sum_{(i,j)} (J_1 \sigma_i \sigma_j + J_2 \tau_i \tau_j + J_4 \sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j)$$

com $J_1 + J_2 \geq 0$, $J_1 + J_4 \geq 0$, $J_2 + J_4 \geq 0$, $e\sigma_i, \tau_i = \pm 1$. Obtemos o diagrama de fases completo, o qual apresenta as fases: ferromagnética (F), ferromagnética-sigma (F_σ), ferromagnética-tau (F_τ), intermediária (I) e paramagnética (P). Os pontos fixos encontrados indicam a presença de somente duas classes de universalidade (Ising e Potts), exibindo a não existência da linha crítica de Baxter, presente na rede quadrada. Os resultados são exatos na rede hierárquica e podem ser interpretados como aproximações para redes de Bravais.

O modelo de Ashkin-Teller na árvore de Cayley.

ARAÚJO, J. M. DE; COSTA, F. A. DA

UFRN

Estudamos as propriedades críticas do modelo de Ashkin-Teller na árvore de Cayley de coordenação finita z ; utilizamos o mapeamento tri-dimensional obtido através de uma formulação anteriormente empregada para o caso de coordenação infinita [1]. O referido modelo consiste de dois sistemas tipo Ising (constante

J_1) acoplados por uma interação de quatro spins (constante J_4). Por meio de argumentos de estabilidade, determinamos a forma completa do diagrama de fases em função da variáveis $p = \frac{J_4}{J_1}$ versus T (temperatura). Observamos que o crescimento do número de coordenação z provoca um aumento na quantidade de fases do modelo, de modo que para $z \geq 8$ o diagrama possui todas as fases do caso limite $z = \infty$.

[1] F. A. da Costa, M. J. de Oliveira and S. R. Salinas, Phys. Rev. B, 36,13(1987)

THE XY-MODEL ON THE ONE-DIMENSIONAL SUPERLATTICE†

GONÇALVES, L. L.

UFCE

LIMA, J. P. DE; LIMA, J. P. DE

UFPI

The isotropic XY-model in a transverse field ($s=1/2$) [1] on the one-dimensional superlattice (closed chain), consisting of alternating layers of two different materials is considered. The exact solution of the model is obtained by using a generalized Jordan-Wigner transformation [2] and the Green function technique. The Green functions are determined by the equation of motion method, which leads to a finite set of linear equations that can be solved analytically. Special attention is given to the study of the excitation spectrum, and the exact results are compared to the approximate ones obtained by using the transfer matrix method introduced by Albuquerque et al. [3], for the study of the phonon spectrum in an identical one-dimensional superlattice. The thermodynamic properties are also studied and some numerical results presented for different width of the layers.

[1] H. E. Lieb, T. Schultz and D. C. Mattis, Ann. Phys. 16, 407(1961)

[2] P. Jordan and E. Wigner, Physik 47, 631(1928)

[3] E. L. Albuquerque, P. Fulco and D. R. Tilley, Rev. Bras. Fis. 16, 315(1986)

†Work partially financed by the Brazilian Agencies CNPq and Finep.

CADEIA LINEAR ALTERNADA DE SPINS D-VETORIAIS E SPINS DE ISING COM INTERACOES DIPOLAR E DE ANISOTROPIA DE ION SIMPLES.

ALVES, C. A. P.; SANTOS, R. J. V. DOS

UFAL

Estudamos a função de partição de uma cadeia linear alternada de spins de Ising $\sigma = \pm 1$ e de spins D-Vetoriais, acoplados por uma interação de exchange entre a componente 1 do spin D-Vetorial e o spin de Ising e com uma anisotropia local de íon simples sobre os spins D-Vetoriais. Dois casos são analisados: a)

Campo de anisotropia acoplado com a componente S_1 do spin D-Vetorial e b) Campo de anisotropia acoplado com a componente S_k (com k diferente) de 1 do spin D-Vetorial. A termodinâmica do modelo é analisada em função dos diversos parâmetros. A Partir dos resultados obtidos pretendemos estender o estudo para o caso de uma rede quadrada de spins de Ising Antiferromagnética, decorada com cadeias de spins alternados como acima descrito.

EXPOENTE CRÍTICO DINÂMICO DO O MODELO DE ISING.

GRANDI, B. C. S.; FIGUEIREDO, W.
UFSC

Utilizamos o grupo de renormalização de campo medio para determinar o expoente crítico dinâmico do modelo de Ising em duas e três dimensões. Esse metodo permite a determinação simultânea do acoplamento crítico próxima à transição de fases e do expoente crítico dinâmico associado. Consideramos blocos de um, dois, quatro e nove spins para a rede bidimensional e blocos de um, dois, quatro e oito spins na rede cúbica. Mostramos que o expoente crítico dinâmico obtido por este metodo quando comparamos blocos de tamanhos finitos, apresenta valores que se aproximam daqueles determinados por outros metodos. Entretanto, quando consideramos blocos na rede quadrada que não apresentam a simetria da rede os resultados obtidos para o acoplamento crítico não são iguais àqueles que esperamos para o equilíbrio. Esse problema aparece porque não é possível escrever uma expressão para a equação de movimento que contenha apenas termos diagonais na magnetização do bloco. Os diferentes spins do bloco finito têm pesos diferentes e devemos encontrar uma forma adequada para obter os modos normais.

Fenômenos Críticos e Transições Estruturais (EST, POL) - 10/06/94

DEPENDÊNCIA DA TEMPERATURA CRÍTICA DE ISING SOBRE OS SÍTIOS PERIFÉRICOS

CHAO, N. C.
UFRN

Calculamos as temperaturas críticas t_c para algumas redes tais como as de 3-4 e 4-6 e investigamos a dependência destas, bem como outras conhecidas, sobre os números de sítios periféricos por ligação S . Para isto, introduzimos um parâmetro u , que é uma função de t_c ,

de modo que a seguinte relação de dualidade seja verdadeira:

$$u + u^* = 1$$

A dependência de u sobre S é esboçada num gráfico de zu em função de zs , onde z é o número de coordenação. O nosso gráfico mostra um comportamento aproximado de estados correspondentes. Este comportamento está de acordo com o de percolação de ligação que verificamos anteriormente.

Diagrama de fases do Potts antiferromagnético com $q = 3$ e 4 estados em redes quadradas bidimensionais

FERREIRA NETO, S. J.
UFMG
SOKAL, A. D.
New York University

Utilizamos o algoritmo de Wang, Swendsen e Kotecky para estudar as transições de fase e os expoentes críticos em modelos de Potts antiferromagnéticos com $q = 3$ e 4 estados. Para a rede quadrada com 3 estados o modelo apresenta um ponto crítico em $T = 0$ enquanto com $q = 4$ o modelo já é desordenado com decaimento exponencial das correlações em $T = 0$. No modelo com $q = 3$ estados foram feitas simulações em redes com dimensão linear até $L = 1536$ e com comprimento de correlação $\xi \approx 10^4$, utilizando uma nova técnica de finite size scaling. Nossos resultados sugerem que o comprimento de correlação se comporta como $\xi \sim \beta^p \exp 2\beta$ onde $p \approx 1$. Mostramos rigorosamente que para $q > 2 \times$ (número de vizinhos próximos) o modelo está desordenado em qualquer temperatura.

UM NOVO ALGORITMO DE CLUSTER PARA ESTUDAR TRANSIÇÕES DE PRIMEIRA ORDEM EM SISTEMAS DE SPINS 1.

BOUABCI, M. B.; CARNEIRO, C. E. I.
USP

Neste trabalho propomos um novo algoritmo de cluster do tipo de Wolff para estudar transições de primeira ordem no modelo de Blume Capel. Neste modelo, a temperaturas suficientemente baixas, a fase ferromagnética é separada da fase paramagnética por uma linha de primeira ordem que termina em um ponto tricrítico. Na transição entre estas duas fases o número de spins com projeção $S^z = 0$ muda drasticamente. Devido a este fato, os algoritmos de cluster do tipo de embedding usuais, que apenas mudam o sinal dos spins, não são adequados para descrever a dinâmica desta transição. Mostramos que nossa prescrição para crescer clusters acelera o decaimento dos estados metaestáveis eliminando completamente efeitos de histerese. Desta forma, utilizando

teoria de escala de tamanho finito, obtemos uma localização precisa da linha de primeira ordem do modelo de Blume Capel em uma rede quadrada.

MODELO DE BLUME CAPEL: GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO POR ESCALA DE TAMANHOS FINITOS

OLIVEIRA, S. M. DE; OLIVEIRA, P. M. C. DE
UFF
BARRETO, F. C. DE S.
UFMG

O modelo de Blume Capel foi introduzido em 1966 para descrever alguns magnetos com propriedades interessantes. Em particular, há um ponto tricrítico dividindo a fronteira crítica em dois pedaços. Num deles a transição de fase é de primeira ordem, enquanto no outro é de segunda, caindo na classe de universalidade do modelo de Ising ordinário. O cruzamento de comportamentos críticos que ocorre neste ponto é um fenômeno bastante interessante, que ocorre em vários sistemas reais.

Do ponto de vista teórico, o Grupo de Renormalização é a teoria adequada para descrever este fenômeno de cruzamento. Num espaço de parâmetros bidimensional, correspondendo ao campo de anisotropia D e à constante de acoplamento J , o ponto tricrítico deve corresponder a um ponto fixo instável da transformação de escala. O fluxo de renormalização em torno deste ponto deve apresentar dois autovalores maiores do que a unidade, a razão entre seus logaritmos sendo o expoente de cruzamento correspondente. Apesar de decorridos quase 30 anos desde a sua introdução, não se conhece tratamento de grupo de renormalização que descreva corretamente o diagrama de fase deste modelo. É justamente um tal tratamento que será introduzido neste trabalho.

MODELO PARA MICROEMULSÕES NA PRESENÇA DE CAMPO EXTERNO

BARBOSA, M. C.; FRICHEMBRUDER, M.
UFRGS

Estudamos o modelo de Widom para microemulsões na presença de um campo externo. Este modelo apresenta para $h \neq 0$ uma fase desordenada, uma fase da ordenada (que pode ser estruturada ou não), uma fase ordenada (água ou óleo) e uma fase ordenada modulada. Demonstramos recentemente que a transição entre a fase para e modulada é de primeira ordem para regiões longe do ponto onde as três fases se encontram, um ponto que, em campo médio, apresenta características de um ponto de Lifshitz. Com o objetivo de entender melhor o diagrama de fases deste sistema, introduzimos um campo externo que quebra simetria da fase modulada. Como consequência disto, aparece, como seria

de se esperar, uma direção preferencial de modulação, fase lamelar. Além desta fase, fases hexagonais surgem. Obtemos o diagrama de fases primeiro em campo médio e, após incluindo flutuações para regiões longe do ponto de Lifshitz. Usando este diagrama, extrapolamos nossos resultados de forma consistente e obtemos o comportamento no ponto de Lifshitz.

INCOMMENSURATE MODULATION AND PHASE TRANSITION IN A TRIANGULAR LATTICE WITH "ANTI-FERRO" INTERACTION BETWEEN NEXT-NEAREST NEIGHBOURS

LICINIO, P.; KONZEN, F.; SILVA, J. K. L. DA;
PIMENTA, M. A.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte

The study of a system of continuous spins on a triangular lattice evolving as a Cellular Automaton will be presented. Interactions between next-nearest neighbours are "antiferromagnetic" and therefore the system is frustrated. Initially disordered lattices are seen to organize into modulated patterns. We considered situations where the CA algorithm is isotropic in the lattice directions as well as where it is anisotropic. It is shown that frustration on the triangular lattice is not a sufficient condition for the appearance of an incommensurate modulation; anisotropy, which breaks the hexagonal symmetry of the lattice, must also be introduced. There is a commensurate-incommensurate phase transition as the parameter describing the magnitude of the anisotropy is increased.

TEORIA DAS CORRELAÇÕES INTERATÔMICAS PARA CRISTAIS ANARMÔNICOS.

ZUBOV, V. I.; PASCUAL, M. F.; RABELO, J. N. T.
Universidade Federal de Goiás

Em caso de haver efeitos anarmônicos, especialmente se estes forem fortes, torna-se conveniente descrever um cristal por meio de excitações unárias (vibrações não-lineares dos átomos ao redor dos seus sítios) incluindo as correlações entre os átomos. Suas principais características são os momentos quadráticos de correlação [1], neste caso $\overline{q_i^\alpha q_j^\beta}$, onde \vec{q}_i e \vec{q}_j são os deslocamentos dos átomos de número i e j de seus sítios na rede, α e β são índices cartesianos. Para o cálculo destes momentos emprega-se o método correlativo do campo autoconsistente não-simetrizado [1,2]. Ele permite levar em conta a contribuição dos principais termos anarmônicos às funções termodinâmicas do cristal já na aproximação zero. Com a primeira e segunda ordem da teoria de perturbações são obtidas as fórmulas gerais para os momentos de correlação interatômicos

numa rede de dimensão e estrutura arbitrária com termos anarmônicos de terceira e quarta ordens. Estas fórmulas são aplicáveis para cristais tanto com anarmonicidade fraca como forte. São construídos diagramas que representam graficamente as contribuições de diferentes termos nas correlações. No caso de anarmonicidade fraca a primeira ordem da teoria de perturbação dá a seguinte relação entre a correlação de primeiros vizinhos e o deslocamento médio quadrático do átomo em um cristal perfeito de alta simetria com forças de curto alcance

$$\overline{q_{ix}q_{jx}} = n\overline{q_x^2}/Z$$

onde n a dimensão do espaço e Z o número de coordenação. Para alguns tipos de rede são obtidos resultados na segunda ordem da teoria também. Parte destes são mostrados em posters.

1. Ia.P. Terletsky, Statistical Physics, Vysshaya shkola, Moskva, 1967, in Russian, North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1971.
2. V.I. Zubov, M.F. Pascual, Izvestia Vuzov, Fizika, 27, n6, 67(1984), em russo.
3. V.I. Zubov, M.F. Pascual and J.N. Teixeira Rabelo, Phys. Stat. Sol. (b), 175, 331(1993).

MODELO PARA FRATURAS EM MATERIAIS FIBROSOS.

BERNARDES, A. T.
UFOP
MOREIRA, J. G.
UFMG

Apresentamos um modelo de "feixe de fibras" que busca descrever a morfologia de fraturas em materiais fibrosos (1). O material a ser estudado é simulada por um número N de tiras paralelas. Este "feixe de fibras" é tracionado em uma direção paralela às fibras por meio de passos discretos, sendo que uma tira pode romper-se com uma probabilidade proporcional à energia elástica $E = Kx^2/2$, bem como à quantidade de tiras vizinhas inteiras. A constante K é igual para todas as fibras. A ruptura de uma das tiras irá aumentar a probabilidade de ruptura das tiras vizinhas, podendo provocar o aparecimento de trincas no interior do material.

Estudamos o modelo para o caso em $(2+1)$ dimensões. Obtivemos vários diagramas de tensão *vs* alongamento e diagramas de tenacidade *vs* temperatura, buscando caracterizar os vários tipos de fraturas (frágeis ou dúcteis). Finalmente, calculamos os histogramas do tamanho das trincas que se propagam no interior do material, a fim de ter condições de definir se neste processo há criticalidade auto-organizada.

(1) Bernardes and Moreira, aceito para publicação em Phys. Rev. B

*Sistemas Complexos III, Polímeros
(EST, POL) - 10/06/94*

POLYMER DESCRIBED AS A CRITICAL CLUSTER

ALEXANDROWICZ, Z.
Depto. de Física - UFRN

The average radius and critical number of configurations of a linear polymer of length l (number of segments), scale as $r \approx l^\nu$ and $W_c \approx l^{\gamma-1}$, respectively. Exponents ν and γ have been estimated, in general dimension d , with the help of a novel method. Lets imagine a random stepwise construction of a polymer configuration. It will terminate whenever its pathway crosses itself (excluded volume). Hence we must adopt a construction that bifurcates on its way, so that, at criticality, one surviving pathway describes a polymer of indefinite length. Due to fluctuation however, such a critical construction bifurcates into b' alternative pathways. The reduced number of these, $w' = b'/l$, constitutes the proper microscopic weighting function for given polymer configuration. In fact w' constitutes the microscopic counterpart of W_c , that no one ever bothered to define (despite obvious theoretical importance!). Just the definition of w' , without need to actually evaluate it, carries a long way. Assuming a universality of correlation, we relate w' to radius r' and derive a first equation, $\gamma = \gamma(\nu)$. The second is a Flory-like equation. It is reformulated however as an average of configurations of given microscopic r' , weighted by corresponding w' . Again without having to actually evaluate the average, but just assuming the existence of a correlation between r' and w' , leads to $\nu = \nu(d)$ different from Flory's. The two equations reproduce the exact ν and γ at $d=2$, are very accurate at $d=3$, and at $d=4 - \epsilon$ agree with the exact expansion to $O(\epsilon^2)$. The approach seems to suggest a new way to study criticality.

DIAGRAMA DE FASES DO AUTÔMATO CELULAR DE DOMANY E KINZEL

ZEBENDE, G.; PENNA, T. J. P.

UFF

O autômato celular probabilístico de Domany e Kinzel é um dos mais interessantes já estudados. Na sua versão unidimensional, este autômato apresenta duas transições de fases: em uma delas o parâmetro de ordem é a magnetização enquanto na outra transição o parâmetro de ordem é o dano. O diagrama de fases já havia sido obtido anteriormente por Martins et al. (*Phys.Rev.Lett.* 66 2045 (1991)), utilizando técnicas de Monte Carlo tradicionais. Neste trabalho, utilizamos tanto o método do gradiente como o dano no gradiente para extrair o novo diagrama de fases, onde os fortes efeitos de tamanho finito foram minimizados (*J.Stat.Phys.* 74 1273 (1994)). Efeitos de tamanho e tempo finitos são sugeridos como os responsáveis para as discrepâncias entre nosso diagrama e aquele encontrado por Martins et al, para ambas as transições. Vale a pena citar que além da maior precisão obtida, pois o método do gradiente mede diretamente a posição do ponto crítico enquanto o método tradicional de Monte Carlo vai "cercando" a fronteira, o esforço computacional foi extremamente reduzido. O nosso código foi implementado utilizando a técnica de "multispin coding", embora a necessidade constante de gerar números aleatórios minimizam as vantagens de utilizar-se de tal técnica. A maioria dos nossos resultados foram obtidos a partir de redes com 640 sítios, enquanto Martins et al. utilizaram-se de redes com até 10000 sítios. Os expoentes de cada transição foram obtidos com maior precisão que os já citados na literatura e mesmo esta precisão pode ser ainda melhorada se utilizarmos tempos maiores de computação.

MODELO PARA POLIMERIZAÇÃO EM CONDIÇÕES DE EQUILÍBRIO QUÍMICO NA REDE QUADRADA ANISOTRÓPICA.

STILCK, J. F.

UFSC

Estudamos o comportamento termodinâmico de um modelo para polimerização em condições de equilíbrio químico numa rede quadrada com fugacidades diferentes nas duas direções da rede. Resultados anteriores para este mesmo modelo na rede de Bethe¹ indicam a existência de duas fases polimerizadas distintas no diagrama de fases do modelo. Cálculos de grupo de renormalização fenomenológico indicam a existência de duas transições de fases no modelo, a primeira entre a fase não polimerizada e a fase polimerizada usual e a segunda entre a fase polimerizada usual e a fase em que as cadeias poliméricas ocupam todos os sítios da rede. O estudo foi realizado a partir da resolução do modelo em tiras de largura finita, usando a técnica da matriz

de transferência de tal forma que a direção de transferência seja ao longo de uma das diagonais da rede. 1) E. Botelho e J. F. Stilck, *Phys. Rev. E* 48, 723 (1993).

FASES DENSAS DE COPOLÍMEROS

IZZO, D.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

MARQUES, C. M.

Institut Charles Sadron, Strasbourg

Os sistemas densos de copolímeros dibloco apresentam uma fascinante variedade de estruturas cristalinas, desde esméticos unidimensionais, passando por fases hexagonais a duas dimensões ou cúbicos-centrados tridimensionais, até às mais exóticas fases bicontínuas. A estabilidade termodinâmica destas estruturas depende essencialmente de dois parâmetros: a compatibilidade entre as espécies químicas (monômeros) que constituem os dois blocos e a massa relativa dos blocos (assimetria). No entanto a cinética de cristalização pode ser extremamente lenta devido ao alto peso molecular dos copolímeros por um lado e, por vezes, à proximidade da transição vítrea. Assim, experimentalmente e industrialmente, as vias de preparação recorrem às fases intermediárias menos concentradas, onde pelo menos um solvente de baixo peso molecular permite a aceleração do processo cristalizador. Nesse trabalho teórico estudamos extensivamente a formação de fases diluídas de copolímeros dibloco e tribloco num solvente seletivo e mostramos que para valores superiores à uma assimetria crítica, as fases diluídas coexistem com fases de matrizes copoliméricas densas, no interior das quais organizam-se regiões de polímeros dissolvidos.

*Caos, Instabilidades, Simulações
e Sistemas Dinâmicos (EST) -
10/06/94*

RECEITA PARA UNIVERSO DIVERSIFICADO

GOMES, M. A. F.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE
FEDERAL DE PERNAMBUCO

Dois ingredientes teóricos são aparentemente necessários para o entendimento de um universo capaz de evoluir para um estado complexo caracterizado pela produção de estruturas diversificadas e de todas as escalas de tamanho. Primeiramente, é preciso um princípio estatístico global que indique as condições nas quais se torna mais favorável a obtenção de uma maior produção

de diversidade de estruturas por unidade de massa, independentemente de detalhes da dinâmica do universo. Em segundo lugar, precisa-se de outro ingrediente, local, assegurando que as estruturas formadas possam existir com um mínimo de estabilidade por certo tempo. Neste último aspecto entram detalhes sobre a natureza da dinâmica ao nível de cada estrutura formada (em nosso universo, por exemplo, envolve considerações quânticas e relativísticas). Este trabalho discute os dois aspectos de um modo geral e o primeiro deles, o princípio estatístico para produção de diversidade, em grande detalhe, baseando-se nos resultados de extensivas simulações numéricas de processos de não-equilíbrio publicados ao longo dos últimos anos. A utilização desses dois ingredientes parece apontar, entre outras coisas, para uma explicação satisfatória acerca da tridimensionalidade de nosso (diversificado) mundo físico.

COMPARAÇÃO DE ALGORITMOS PARA O CÁLCULO DE ESPECTROS DE EXPOENTES DE LYAPUNOV DE SÉRIES TEMPORAIS.

OIWA, N. N.; FIEDLER-FERRARA, N.
IF/USP

Quatro diferentes algoritmos (Wolf *et al.* [Phys. 16D, 285, 1985], Eckmann-Ruelle [Phys. Rev. A34, 4971, 1986], Sano-Sawada [Phys. Rev. Lett. 55, 1082, 1985] e Brown *et al.* [Phys. Rev. A 43, 2787, 1991]) para o cálculo de expoentes de Lyapunov de sistemas dinâmicos são comparados relativamente à eficiência e precisão. Os métodos são avaliados utilizando-se os mapas quadrático e de Hénon e os fluxos de Lorenz, Rössler e Mackey-Glass. Os parâmetros envolvidos são exaustivamente variados de maneira a testar a robustez. Em particular, seus desempenhos relativamente à precisão numérica e sob contaminação ruidosa são comparados. Os resultados obtidos mostram que o método de Brown é ligeiramente superior àqueles de Sano-Sawada e de Eckmann-Ruelle, sendo que nesse último a escolha dos parâmetros adequados para a obtenção de resultados corretos é crítica. O método de Wolf apresentou invariavelmente estimativas muito acima do esperado. A convergência para o valor esperado nos métodos de Sano-Sawada e Brown é mais rápida do que nos demais métodos. Embora os resultados obtidos na maioria dos algoritmos sejam comprometidos pela contaminação com ruído de 1%, a análise adotada no caso do método de Eckmann-Ruelle permite obter bons resultados para níveis de ruído até 5%. Apresentam-se também resultados conclusivos para os expoentes de Lyapunov, obtidos pela utilização dos quatro algoritmos, que mostram evidências de comportamento caótico em sinais experimentais associados com flutuações de densidade eletrônica medidas por sondas eletrostáticas colocadas na beirada do tokamak TBR-1.

Signal To Noise Ratio In Stochastic Resonance

CHATTAR, A. K.; BRIOZZO, C. B.; OSENDA, O.
Facultad de Matemática, Astronomía y Física Universidad
Nacional de Córdoba. Argentina
CACERES, M. O.
Centro Atómico Bariloche - C.N.E.A. Argentina

Stochastic Resonance is a cooperative phenomenon between noise and periodic forcing in a bistable system. The process can be modeled by an overdamped Brownian particle in a quartic potential whose stable and unstable minima are periodically exchanged due to an external forcing.

In this work the Fokker-Planck equation (FPE) for the problem is solved by Path Integral methods. The short-time propagators are calculated in the WKB (small noise) approximation. From them the one time asymptotic probability distribution $P_{as}(x, t)$ and the correlation functions are computed numerically through an iterative procedure using the Chapman-Kolmogorov equation. The signal-to-noise ratio R is calculated as a function of the noise intensity for parameter values showing stochastic resonance.

MODELOS DE AUTOMATA CELULAR PARA CONDIÇÕES GERAIS DE TRÁFEGO LINEAR

VILAR, L. C. Q.; SOUZA, A. M. C. DE
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O tratamento do problema de fluxo de tráfego sempre esteve fundamentalmente baseado na análise de dados experimentais. No entanto, a pobreza de dados em regiões críticas levou a uma série de diferentes interpretações acerca do comportamento da relação entre os parâmetros fundamentais: densidade e fluxo. Estas interpretações incluíam propostas tão divergentes quanto as formas "lambda reversa", descontínua, e contínua para a relação fluxo-densidade. Em parte, isto foi causado pela ausência de critério nos métodos experimentais usados, o que indica a necessidade de uma abordagem teórica correta ao problema para guiar esta pesquisa. Esta questão permanece em aberto até hoje. Os primeiros modelos teóricos eram modelos de fluidos e equações não lineares. Eles eram adequados para tratar trânsito a altas ou baixas densidades, mas não tinham como ser trivialmente estendidos a todo o intervalo de densidades observáveis. Então, eles não poderiam ser de muita ajuda no esclarecimento da forma precisa da relação fundamental. Por esta razão, e pelo fato de pretendermos examinar o problema de vias sinalizadas, nós baseamos nosso trabalho nos modelos de automata celular para tráfego recentemente introduzidos na literatura^a. Com esse método, acreditamos ter obtido uma descrição razoável para a relação fluxo-densidade em auto-estradas. Também propomos uma explicação

para a relação não-funcional entre fluxo e densidade no caso de trânsito em rodovias sinalizadas, o que também não havia sido tratado por nenhum modelo teórico até agora. Assim, nossos resultados parecem estar qualitativamente em acordo com os dados experimentais, esclarecendo alguns pontos intrigantes na pesquisa de tráfego.

^aK. Nagel e M. Schreckenberg, J. Physique I, vol. 2 (1992) 2221

CÁLCULOS DA DEPENDÊNCIA DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO FULERENO SÓLIDO COM RESPEITO À TEMPERATURA.

I, V. I.; TRETIKOV, N. P.; TEIXEIRA RABELO, J. N.

Universidade Federal de Goiás

ORTIZ, J. F. S.

Universidade Russa da Amizade dos Povos

A descoberta das enormes moléculas de carbono C_{60} , C_{70} , C_{76} ,..., denominadas fulerenos, nas quais os átomos estão dispostos na superfície de uma esfera do tipo de uma bola de futebol ou uma esferóide, e a obtenção de sólidos compostos destas moléculas incomuns [1], despertaram um interesse crescente pelos estudos teóricos e experimentais de suas propriedades. Usando o método correlativo do campo autoconsistente não-simetrizado para cristais fortemente anarmônicos [2] nós calculamos a distância interatômica, a densidade, a energia de ligação, a compressibilidade isotérmica e o coeficiente de dilatação térmica da fase sólida do C_{60} com rede cúbica de faces centradas, que ocorre quando $T=260K$, em função da temperatura. Os resultados, obtidos com os potenciais intermoleculares de Girifalco [3] e Yakub [4], são comparados entre si, com resultados existentes de cálculos de outros autores e com dados experimentais. Discutimos o papel dos efeitos anarmônicos e quânticos. A anarmonicidade exerce uma influência essencial sobre as diferentes propriedades do fulereno sólido, especialmente a temperaturas elevadas. Os efeitos quânticos resultam ser desprezivelmente pequenos em toda a região de existência da fase considerada em face da grande massa da molécula C_{60} e da grande profundidade do poço do potencial intermolecular.

1. H.W. Kroto, A.W. Allaf and S.P. Balm. Chem. Rev., 91, 1213(1991). 2. V.I. Zubov. Phys. stat. sol. 87, 385, 88,43(1978). 3. L.A. Girifalco. J. Phys. Chem. 96, 958(1992). 4. L.N. Yakub. Fizika Nizkih Temperatur, 19, N6, p.726-727(1993).

DESLOCAMENTOS RELATIVOS MÉDIOS QUADRÁTICOS EM UMA REDE QUADRADA ANARMÔNICA.

PASCUAL, M. F.; ZUBOV, V. I.

Universidade Federal de Goiás

O método correlativo não-simetrizado do Campo Autoconsistente é utilizado para estudar os deslocamentos relativos médios quadráticos dos átomos em modelos bi-dimensionais considerando a anarmonicidade e as correlações interatômicas [1,2]. Obtemos expressões para estas grandezas com a ajuda da primeira e segunda ordens da teoria de perturbações, levando em conta termos anarmônicos até quarta ordem. Construímos os diagramas correspondentes. Concretamente, calculamos os deslocamentos relativos médios quadráticos dos átomos entre os primeiros, segundos, terceiros e mais distantes vizinhos ao longo dos eixos x e y para uma rede quadrada anarmônica e aplicamos um potencial de curto alcance. Para todos os casos, o eixo x está dirigido ao longo da linha que une o par de vizinhos considerados. Investigamos o comportamento destes deslocamentos relativos médios quadráticos em relação à temperatura, observando efeitos anarmônicos em consequência das vibrações dos átomos. Os momentos de correlação dos deslocamentos ao longo do eixo y são completamente determinados pela anarmonicidade. Comparamos os deslocamentos relativos médios quadráticos de uma rede quadrada com os resultados recentemente obtidos para uma cadeia linear monoatômica [2].

1. V.I. Zubov, M.F. Pascual and J.N. Teixeira Rabelo, Phys. Stat. Sol.(b), 175,331(1993).

2. V.I. Zubov, M.F. Pascual, J.N. Teixeira and A.C. de Faria, Phys. Stat. Sol.(b), 182, N2(1994).

MOMENTOS DE CORRELAÇÃO INTERATÔMICA PARA UMA REDE HEXAGONAL ANARMÔNICA

PASCUAL, M. F.; RODRIGUES, C. G.; ZUBOV, M. F.

Universidade Federal de Goiás

O presente trabalho tem em vista o cálculo dos momentos de correlação interatômica para uma rede hexagonal anarmônica. Aplicamos o método correlativo não-simetrizado do campo autoconsistente (cusf) [1,2] e utilizamos a teoria de perturbações até segunda ordem. Consideramos potenciais de curto alcance, por exemplo o potencial de Morse, obtendo correlações quadráticas, na segunda ordem da teoria de perturbação, para os deslocamentos dos átomos ao longo da linha que os une como também para os deslocamentos perpendiculares a esta linha. Estes últimos são totalmente determinados pela anarmonicidade das vibrações dos átomos. Investigamos a dependência destes momentos interatômicos com a temperatura. Os resultados são comparados com

dados conhecidos para uma rede quadrada anarmônica. Uma das conclusões é que as correlações quadráticas de uma rede hexagonal com 6(seis) primeiros vizinhos é menor que o de uma rede quadrada com 4(quatro) primeiros vizinhos. Também concluímos que os momentos interatômicos para os primeiros, segundos e terceiros vizinhos são diferentes de zero para uma rede hexagonal.

[1] V.I. Zubov, M.F.Pascual, *Izvestia Vuzov, Fisika*, 27, No. 6, 67, (1984), (em russo) [2] V.I. Zubov, M.F.Pascual and J.N. Teixeira Rabelo, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 175, 331, (1993)

PROPRIEDADES DE CRISTAIS NAS VIZINHANÇAS DO LIMITE DA ESTABILIDADE TERMODINÂMICA.

ZUBOV, V. I.; CAPARICA, A. A.; TRETIKOV, N. T.

Universidade Federal de Goiás

ORTIZ, J. F. S.

Universidade Russa da Amizade dos Povos

A possibilidade de superaquecer cristais a temperaturas acima de seus pontos de fusão é um fato já firmemente estabelecido, tanto experimentalmente, como no âmbito da teoria estatística e das simulações computacionais (e.g. [1- 4]). Entretanto, as experiências envolvendo estados metaestáveis apresentam grandes dificuldades. Em nosso trabalho desenvolvemos um estudo teórico das propriedades termodinâmicas do cristal nas proximidades do limite de estabilidade. Exploramos as particularidades de cristais de Van-der-Walls de estrutura cúbica de face centrada (neônio, argônio, criptônio, xenônio) empregando o método correlativo do campo autoconsistente não-simetrizado para cristais fortemente anarmônicos [2]. As forças interatômicas foram descritas pelo potencial de Lennard-Jones, bem como, pelo potencial de três partículas de Axilrod-Teller. Foram também avaliadas as contribuições das primeiras correções quânticas. Calculamos os expoentes que regem as peculiaridades do cristal nas vizinhanças do ponto de instabilidade e verificamos que perto do ponto de perda da estabilidade na isobara T_s, α_s , as propriedades do cristal se comportam da seguinte forma: parâmetro de rede $a - a_s \sim (T_s - T)^{-1/2}$, módulo isotérmico de elasticidade $B_T \sim (T_s - T)^{1/2}$, coeficiente de expansão térmica e capacidade calorífica isobárica $\alpha, C_p \sim (T_s - T)^{-1/2}$. 1. N.M. Plakida e T. Siklos, *Acta. Phys. Hung.* 45,37 (1978) 2. V.I. Zubov, *Phys. Stat. Sol.(b)* 87,385,88,43(1978) 3. V.G. Baidakov, A.E. Galashev e V.P. Skripov, *Fiz Tverdogo Tela (URSS)* 22,2681(1980) 4. M.M. Martynuk, *termochim. acta* 206, 55(1992).

Aproximação dinâmica auto-consistente para o antiferromagneto de Ising diluído em um campo magnético uniforme

TAMASHIRO, M.; SALINAS, S.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Utilizando um procedimento auto-consistente, baseado em um algoritmo de banho térmico de Monte Carlo aplicado a um aglomerado de um spin central cercado por z primeiros vizinhos, obtemos relações de recorrência para a dinâmica dos spins¹. Através da análise de estabilidade dos pontos fixos das relações de recorrência, obtemos o diagrama de fases (temperatura \times diluição \times campo magnético) do antiferromagneto de Ising diluído em um campo magnético uniforme. Observamos uma estrutura de singularidades para o campo crítico a temperatura nula, bem como a ocorrência de fronteiras reentrantes a baixas temperaturas. Verificamos que, mesmo além da concentração de percolação, o sistema pode se ordenar pela aplicação de um campo magnético.

1 R. T. da Silva, M. N. Tamashiro, N. Caticha e S. R. A. Salinas, a ser publicado.

EXPOENTE CRÍTICO DINÂMICO PARA CADEIAS DUPLAS DE SPIN.

SANTOS, M.; FIGUEIREDO, W.

Departamento de Física, UFSC

Estudamos o comportamento dinâmico de uma cadeia dupla de spins onde são levadas em consideração acoplamentos entre quatro spins vizinhos mais próximos. Embora esse sistema tenha solução analítica no equilíbrio, utilizamos a taxa de relaxação inicial do parâmetro de ordem para determinar um limite inferior para o expoente crítico dinâmico z . Mostramos que para as dinâmicas de Glauber e Kawasaki o expoente z depende dos detalhes microscópicos da hamiltoniana, o que parece confirmar uma não universalidade. Esse mesmo tipo de comportamento já foi observado para o modelo de Ising unidimensional com interações de troca não homogêneas (J.K. Leal da Silva, Tese de Doutorado, Genebra, 1987).

COMPARAÇÃO ENTRE AS PRESCRIÇÕES DE GLAUBER E METROPOLIS PARA OS ESTADOS ESTACIONÁRIOS DO MODELO DE ISING.

PAULA, G. L. DE S.; FIGUEIREDO, W.

Departamento de Física, UFSC

Estudamos os estados estacionários do modelo de Ising através da evolução temporal via equação mestra. Inicialmente consideramos o caso no qual um gradiente

de temperatura é estabelecido sobre o sistema com condições de contorno na superfície. Determinamos os perfis da magnetização em uma e duas dimensões para as taxas de transição de Glauber e Metropolis nos estados estacionários. Mostramos que os estados estacionários são diferentes quando correlações são desprezadas. Por exemplo, em uma dimensão, utilizando-se a taxa de Metropolis, mostramos que o estado ferromagnético é instável mesmo se $T = 0$. Ao contrário, com a taxa de Glauber, obtemos a temperatura crítica correta do modelo de Ising unidimensional. Ao contrário, quando correlações entre primeiros vizinhos são consideradas, ambas as taxas levam ao mesmo estado estacionário.

SUPRESSÃO E EXCITAÇÃO DE CAOS NUM SISTEMA MODELADO POR UM MAPEAMENTO 1D

BRAUN, T.; HASENACK, A. C.

Instituto de Física da UFRGS

Um sistema dinâmico pode muitas vezes ser modelado por uma equação de movimento a tempo discreto, tomando-se como um exemplo genérico a equação $x_{i+1} = f(x_i, \mu)$ que representa um mapeamento unidimensional (1D). Neste caso x_i é a variável dinâmica e μ é um parâmetro de controle. Variando-se μ o sistema pode apresentar bifurcações (isto é, mudanças qualitativas no seu comportamento dinâmico) que podem resultar numa evolução muito complexa e dita ser caótica. Um dos paradigmas destes mapeamentos 1D é o mapeamento logístico $x_{i+1} = 4\mu x_i(1 - x_i)$ extensivamente estudado na literatura. Neste trabalho consideramos como sistema dinâmico a descarga elétrica, sendo a corrente elétrica que flui na descarga a variável dinâmica observada. Sabe-se que em condições adequadas (T. Braun et al. Phys. Rev. Lett. 59, 613 (1987); T. Braun et al. Phys. Rev. Lett. 68, 2770 (1992)) esta corrente apresenta uma oscilação que pode apresentar bifurcações culminando num estado caótico. Esta seqüência de bifurcações pode ser modelada por um mapeamento 1D como o mapeamento logístico. Neste trabalho estudamos a dinâmica da descarga quando submetida a uma perturbação dependente do tempo (iteração) tal que $x_{i+1} = f(x_i, \mu) |_{\mu=cte} - \varepsilon_i$. Mostra-se que o estado dinâmico do sistema com $\mu = cte$ varia em função da amplitude da perturbação ε_i . De fato, ε_i funciona como novo parâmetro de controle e variando-se linearmente a sua amplitude em função da iteração i obtém-se a mesma seqüência de bifurcações que se observa no sistema não perturbado variando μ . Conclui-se portanto que com a aplicação adequada de uma perturbação dependente do tempo pode-se suprimir ou excitar o comportamento caótico. Mostra-se ainda que esta sistemática está de acordo com o que se convencionou chamar de controle do caos (Ott et al. Phys. Rev. Lett. 64, 1196 (1990)).

ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DE DANOS NO MODELO DE ISING NA REDE QUADRADA TOTALMENTE FRUSTRADA

A. JÚNIOR, A.; NOBRE, F. D.; MARIZ, A. M.; COSTA, F. A. DA
UFRN

A técnica da propagação de danos tem contribuído recentemente para a compreensão do espaço de fases de sistemas físicos e despertado interesse no que diz respeito a uma possível relação entre os diferentes regimes de propagação do dano e as diversas fases de equilíbrio de modelos estatísticos. No presente trabalho, estudamos o modelo de Ising na rede quadrada totalmente frustrada através da referida técnica. Utilizando a dinâmica de Glauber encontramos um único regime para qualquer temperatura finita (regime caótico), para o qual o dano sempre se propaga, o que pode ser identificado com a não existência de transição de fase para o modelo em questão. A dinâmica do banho térmico produz três regimes distintos, análogos aos já encontrados para outros sistemas com multiplicidade de estados: (a) um regime a baixas temperaturas para o qual o dano final depende das condições iniciais; (b) um regime intermediário onde o dano final é ainda não nulo, embora independente das condições iniciais; (c) um regime de altas temperaturas para o qual o dano não se propaga. As interpretações e analogias com outros sistemas são discutidas.

Efeito de Bombeamento em Sistemas de dois Níveis

PRATAVIERA, G. A.; MIZHAHI, S. S.
Departamento de Física - UFSCar

É de grande interesse o estudo da dinâmica de sistemas quânticos dissipativos. Um dos métodos de atacar o problema é utilizando-se do modelo sistema + reservatório térmico. Em geral nesses estudos é feita a aproximação Markoviana que consiste em considerar o tempo de correlação sistema-reservatório desprezível em relação ao tempo de relaxação do sistema. Experimentos em processos ópticos ultrarápidos colocam em dúvida a aproximação Markoviana, assim é de interesse levar em conta efeitos não-Markovianos no tratamento teórico do problema. Estamos estudando nesse contexto um sistema de dois níveis bombeado por uma força externa dependente do tempo. Pretende-se obter a equação de evolução e a partir disso estudar os efeitos do bombeamento sobre o sistema. Fazendo assim um estudo da coerência e da susceptibilidade levando-se em conta efeitos não Markovianos e influência da temperatura em processos de decoerência e absorção óptica. Suporte financeiro - CNPQ

REGIMES PERIÓDICOS E QUASI-PERIÓDICOS EM UMA TORNEIRA GOTEJANTE.

PINTO, R. D.; SARTORELLI, J. C.; OLIVEIRA, M. J. DE; GONÇALVES, W. M.
IFUSP

Uma sequência de dados experimentais, iniciando-se com $f \approx 38.42 \text{ gotas/s}$ e terminando com $f \approx 39.69 \text{ gotas/s}$, um pouco antes do regime se tornar laminar, está sendo investigada. Os dados de intervalos de tempo entre uma gota e a seguinte, são tratados como sendo uma série pseudo temporal $t(n)$, onde $n = 1, 2, \dots, 1024$. Esta sequência contém 17 séries com os dados apresentando uma relação sinal/ruído decrescente com o aumento da vazão. Os mapas de primeiro retorno apresentam características de comportamento periódico, (período = 5 gotas) para as 7 primeiras séries, e quasi-periódicos para as séries restantes, com períodos fundamentais entre 5 e 6. Dentro da sequência quasi-periódica aparentemente existem 2 regimes periódicos, (período = $11/2$ e 6 gotas ?). A obtenção destes períodos tem sido dificultada pela relação sinal/ruído < 1 . Para a determinação das frequências fundamentais desta sequência com alto ruído vários métodos estão sendo estudados.

ESTUDOS DE REGIMES PERIÓDICOS E QUASI-PERIÓDICOS NUMA TORNEIRA GOTEJANTE PELA DIMENSÃO DE CORRELAÇÃO.

SILVA, J. G. M. DA; SARTORELLI, J. C.; GONÇALVES, W. M.; PINTO, R. D.
IFUSP

Estamos estudando a caracterização, através da estimativa do cálculo da dimensão de correlação, de uma sequência de dados experimentais obtidos em uma torneira gotejante. Os dados de intervalos de tempo entre uma gota e a seguinte são tratados como uma série pseudo-temporal $t(n)$. A sequência, composta por 17 séries, inicia-se com $f \approx 38,42 \text{ gotas/s}$ e termina com $f \approx 39,69 \text{ gotas/s}$, um pouco antes do regime se tornar laminar. As 7 primeiras séries têm comportamento periódico, e as restantes têm características quasi-periódicas. A relação sinal/ruído é decrescente com o aumento da vazão.

A caracterização é feita através da utilização do algoritmo de Grassberger-Proccacia, implementado por Prado e Fiedler-Ferrara [1], que fornece uma estimativa para a dimensão do atrator associado à dinâmica assintótica das séries consideradas. Resultados preliminares serão apresentados e discutidos.

[1] Carmen P. Cintra do Prado, Nelson Fiedler-Ferrara Jr.- IFUSP.

TEMPOS DE RELAXAÇÃO DE UMA TORNEIRA PINGANDO

PENNA, T. J. P.; OLIVEIRA, P. M. C. DE
UFF

Apresentamos, na reunião anterior, mapas de retorno extraídos de simulações computacionais de torneiras pingando, baseadas no modelo de Ising bidimensional com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Nas nossas simulações não incluímos nenhum termo cinético e portanto as gotas não apresentavam movimento de vibração, ingrediente considerado fundamental para a exibição de comportamento complexo no único modelo teórico disponível. Ainda assim, os mapas de retorno apresentam boa concordância com os dados experimentais, principalmente com aqueles obtidos a partir de torneiras de diâmetro da ordem (ou menor que) 1 mm. Intermitências foram detetadas para vários valores do fluxo de líquido. Entretanto, torneiras pingando podem apresentar tempos de relaxação bastante longos e mesmo crises podem ocorrer, com mudança súbita de atratores. A obtenção de resultados experimentais sobre estes tempos de relaxação pode ser bastante complicada devido à dificuldade em, por exemplo, manter a estabilidade do fluxo do líquido e devido a outras flutuações de natureza diversa.

Neste trabalho medimos, através do mesmo esquema computacional adotado no trabalho anterior, estes tempos de relaxação para sequências temporais com grande número de gotas (> 5000). Nas nossas simulações o controle de fluxo é extremamente preciso e não sujeito à flutuações, como nos dados experimentais.

Conditions for Oscillatory and/or Chaotic Behavior in Dissipative Systems

LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

We study general dissipative systems, in particular chemically reacting and hydrodynamical systems, modeled via kinetic (deterministic) equations. After the several (non equilibrium) steady states and their linear stability are computed, bifurcation conditions are explored within a multiple time scale analysis context. Equations for non steady state solutions are obtained, similar (but not equivalent) to the well known Landau-Ginsburg equations in equilibrium statistical mechanics. Analogies are exploited (order parameters, symmetry breaking effects and so on) between dissipative systems and equilibrium phase transitions. Unfortunately there is no general framework to explain and probe the new stable "ordered" structures in dissipative systems, contrary to the equilibrium case. Therefore, no universal criteria nor a general theory for oscillatory and/or chaotic behavior appear to be at hand, nevertheless, for particular classes of dissipative systems, some criteria can be obtained, at present in the form of

necessary conditions. For example, for chemically reacting systems, certain "sum rules" involving cross or auto catalytic stoichiometry, thermally activated reaction rates, heat leak coefficients (system-reservoir) and so on, are to be satisfied if oscillatory and/or chaotic behavior is to be expected. Furthermore, we attempt to include fluctuations into our analysis via Fokker-Planck type equations.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA PROPAGAÇÃO DE DANOS NAS DINÂMICAS DE GLAUBER E BANHO TÉRMICO COM ORIENTAÇÃO DE RUÍDO TÉRMICO

BIBIANO, M. F. DE A.; MOREIRA, F. G. B.
Departamento de Física - UFPE

Muito recentemente de Almeida [1] demonstrou através da enumeração direta das probabilidades de "flip", que a esperada equivalência entre as dinâmicas de Glauber e de banho térmico em simulações de propagação de danos somente poderia ser obtida se levássemos em conta a orientação do ruído térmico bem como a sua intensidade. Na presente comunicação, esta equivalência é demonstrada através de simulações numéricas da propagação de danos no modelo de Ising em redes quadradas de diversos tamanhos. Nossa análise para a distância de Hamming, que expressa a evolução temporal de duas configurações inicialmente sujeitas a vários tipos de danos, corrobora esta observação e levam a resultados que são os mesmos nas duas dinâmicas independentemente das condições iniciais de danos.

[1] Rita M. C. de Almeida, *J. Phys. I (France)* 3, 951 (1993).

ESTUDO DE FLUÍDOS DE MOLÉCULAS DIMÉRICAS HOMONUCLEARES POR SIMULAÇÃO MONTE CARLO

SILVA, F. L. B. DA

Departamento de Química, Faculdade de Ciências, UNESP, Bauru, SP

DEGRÈVE, L.

Departamento de Química, FFCLRP, USP, Ribeirão Preto, SP

O estudo dos fluidos moleculares tem há muito tempo chamado a atenção de teóricos e experimentalistas, por permitir o entendimento de diversos fenômenos tais como: catálise heterogênea, estabilidade de dispersões colóidais, soluções eletrolíticas, sistemas biológicos, etc. Assim, vários modelos têm surgido, tentando explicar como são os fluidos, revelando sua estrutura e, por estas, suas propriedades termodinâmicas. A abordagem dos estudos estruturais geralmente é baseada na determinação das funções de distribuição radial, que são

insuficientes para elucidar a estrutura dos fluidos moleculares. Neste trabalho, apresentamos estudos estruturais baseados nas funções de distribuição ângulo-radial de fluidos de moléculas homonucleares AB e em funções radiais. Foram determinadas, as diversas funções de distribuição radial (AA, AB e BB) assim como $g(r, \theta)$ onde r é a distância entre os centros de duas moléculas e θ o ângulo entre elas. As funções de distribuição radial indicam que a estrutura do fluido não é muito definida aproximando-se nesta densidade, $\rho = 0.5$ (unidades reduzidas), de um fluido contínuo. Pelo $g(r, \theta)$, verificamos pouca frequência de moléculas perpendiculares uma em relação a outras, mostrando que elas têm como orientação preferencial o paralelismo. A introdução da variável θ na função de distribuição nos permite ter mais informações do sistema em estudo o que é de vital importância para aplicação da técnica de Monte Carlo Reverso.

CNPq-Fapesp

Equivalência entre Monte Carlo Dinâmico e equações diferenciais na descrição da reação de $A + A \rightarrow 0$ em uma dimensão

WEINKETZ, S.; CABRERA, G.

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

A reação de aniquilamento $A + A \rightarrow 0$ em uma dimensão é analisada como uma média estocástica sobre o procedimento de Monte Carlo Dinâmico [Fichthorn e Weinberg, *J. Chem. Phys.* 95, 1090 (1991)], em que a evolução temporal do sistema é descrita a partir das taxas temporais dos eventos locais, e do número de suas ocorrências. Aqui são consideradas as taxas de reação (r_r) e difusão (r_d) entre sítios vizinhos. Desta forma se obtém que a taxa de reação é proporcional à densidade de sítios vizinhos ocupados $\Gamma(t)$, *i.e.* $dn(t)/dt = -2r_r\Gamma(t)$, onde $n(t)$ é a densidade de sítios ocupados. Γ depende de n em função da ordem local. Quando a difusão é rápida em relação à reação, a ocupação dos sítios é aleatória, e então $\Gamma = n^2$ (reação de segunda ordem). Quando a difusão é lenta, o sistema não é aleatoriamente desordenado e a equivalência acima não é obtida. Neste caso a ordem local é tratada pela aproximação de probabilidades de sítios e pares de sítios de Kikuchi [*Phys. Rev.* 81, 988 (1951)], com o que se obtém um sistema de duas equações diferenciais ordinárias acopladas, para $n(t)$ e $\Gamma(t)$. Este sistema é resolvido numericamente e comparado com simulações de Monte Carlo Dinâmico, mostrando que o sistema de equações diferenciais obtido é equivalente ao procedimento de Monte Carlo, e permitindo obter as leis de escala de decaimento para a reação. O argumento é facilmente generalizável para sistema de dimensionalidade superior e reações mais complexas.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ESTOCÁSTICAS DA MECÂNICA ESTATÍSTICA

RICCI, T. F.; SCHERER, C.; BRUNET, L. G.
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Equações Diferenciais Estocásticas (EDE's) constituem uma ferramenta matemática muito útil em física, mas métodos para integrá-las numericamente são relativamente pouco conhecidos entre os físicos. Uma classe especial dessas equações e que ocorre freqüentemente em física estatística é constituída pelas Equações de Langevin,

$$dX_\alpha(t) = A_\alpha dt + \sum_\beta B_{\alpha\beta} dW_\beta(t) \quad (3)$$

onde as variáveis $X_\alpha(t)$ são as componentes de um vetor $\vec{X}(t)$ representando um ponto no espaço de fase do sistema, enquanto os coeficientes A_α e $B_{\alpha\beta}$ dependem de $\vec{X}(t)$ e, em geral, explicitamente do tempo; $dW_\beta(t)$ representa o incremento de um processo de Wiener $W_\beta(t)$ ocorrido durante o intervalo infinitesimal dt . Neste trabalho, integramos numericamente um sistema de três equações de Langevin acopladas, através de simulação Monte Carlo. Uma vez que a solução de (1) não é uma simples função, mas um Processo Estocástico (PE), ou seja, uma coleção de realizações (funções do tempo) do PE $X_\alpha(t)$, $N \gg 1$ equações idênticas, com as mesmas condições iniciais, são integradas numericamente, cada qual representando uma particular realização de $X_\alpha(t)$ - a trajetória de uma réplica de um ensemble estatístico. Para cada réplica e para cada passo de integração, é gerado um número aleatório com as propriedades estatísticas apropriadas, representando um incremento, ocorrido durante Δt , do processo de Wiener $W_\beta(t)$. Dessa forma, médias de ensemble para funções de $X(t)$ podem ser obtidas diretamente dos resultados da simulação. No caso do sistema especificamente abordado neste trabalho, $\vec{X}(t) = (X_1, X_2, X_3)$ é um vetor de três componentes que representa a magnetização de uma partícula superparamagnética. Este modelo foi desenvolvido anteriormente por nós para descrever a dinâmica de uma partícula superparamagnética, em que são admitidas flutuações também na magnitude da magnetização.

FASES CAÓTICAS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

ROSAS, A.; COUTINHO, S.
Universidade Federal de Pernambuco, Recife.

A abordagem usada para estudar sistemas dinâmicos não-lineares foi empregada para investigar a estrutura caótica da magnetização local de modelos de spin com frustração. Em particular, consideramos o modelo de Ising com spin 1 (modelo de Blume-Emery-Griffiths) na

rede de Bethe com número de coordenação arbitrário, com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos de gerações consecutivas, interação de intercâmbio biquadrática entre primeiros vizinhos e interação de anisotropia local (*single ion*), em presença de um campo magnético externo. O diagrama de fase do modelo é alcançado via um conjunto de seis equações de recorrência exatas. O diagrama de fase do estado fundamental no espaço de parâmetros do modelo é obtido comparando-se diretamente as energias das diversas configurações possíveis do modelo confirmando o limite $T \rightarrow 0$ do diagrama de fase para $T \neq 0$. Apresentamos um estudo deste modelo no limite em que o número de coordenação tende a infinito (aproximação de campo médio). Neste limite, o diagrama de fase é determinado pelos atratores de um sistema de apenas duas equações de recorrência não-lineares acopladas (mapa bidimensional). Para certo domínio do espaço dos parâmetros, o mapa evolui para *atratores estranhos* caracterizando a existência de regiões do diagrama de fase onde a magnetização teria uma estrutura caótica. Uma análise detalhada dos *atratores estranhos* é apresentada.

CONTROLE DE CAOS NO CIRCUITO DE CHUA.

BAPTISTA, M. DA S.; CALDAS, I. L.
USP

Tendo em vista o estudo do controle de sistemas não lineares através de perturbações externas, foi utilizado o circuito de Chua, com os parâmetros ajustados de forma a se obter regime caótico para com isso verificar a sensibilidade desse sistema a perturbações introduzidas no domínio do tempo. Em primeira instância, o experimento foi simulado em uma workstation Hp, utilizando o método de Range Kutta de quarta ordem, para integrar as equações que caracterizam a dinâmica do circuito de Chua, mais um termo perturbativo, e, em seguida, foi realizada a experiência, com os dados coletados com o auxílio do módulo CAMAC de aquisição de dados do Laboratório de Física de Plasma, montando o circuito de Chua original, com a adição de uma resistência conectada a um gerador de ondas, resgatando dessa maneira, o termo perturbativo introduzido nas equações do sistema, usado na simulação numérica. Comprovou-se que a introdução desse novo termo é o responsável, tanto por um aumento da desorganização do sistema quando para a convergência do sistema para um regime estável e não caótico. Verificou-se que diferentes tipos de ondas, tais como pulsos, ondas quadradas, senoides, geravam resultados qualitativamente semelhantes e que o controle das oscilações caóticas era obtido com um ajuste da frequência e da amplitude das ondas. Será discutida, com alguns exemplos, a diferença entre perturbações introduzidas no domínio do

tempo, caso que será apresentado, e perturbações introduzidas no domínio do espaço, ou seja, somente quando o atrator do sistema estiver passando por uma determinada seção de Poincaré.

Análise em Tempo Real do Decaimento de Estados Metaestáveis

CAVALCANTI, R. M.
PUC-RJ
CARVALHO FILHO, C. A. A. DE
UFRJ

Calculamos a taxa de decaimento para um estado correspondente a uma matriz densidade térmica centrada em um estado metaestável. Os cálculos normalmente encontrados na literatura^a fornecem taxas de decaimento constantes no tempo, numa situação que corresponde à presença de um reservatório que repõe a população do estado metaestável numa taxa igual àquela com que ele decai. Tal reservatório está ausente em nossos cálculos, o que resulta numa taxa de decaimento intrinsecamente dependente do tempo.^b Tratamos o problema numa aproximação semiclássica, procurando estimar a contribuição relativa do tunelamento quântico e da ativação térmica. Indicamos como generalizar nossos resultados para Teoria Quântica de Campos e apontamos possíveis aplicações.

^aJ. S. Langer, *Ann. Phys.* **41**, 108 (1967); *ibid* **54**, 258 (1969); Ian Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 388 (1982).

^b"Quantum Statistical Metastability Revisited" by D. Boyanovsky *et al.*, University of Pittsburgh Preprint PITT-93-04 (1993).

MAPEAMENTO QUADRÁTICO MODULADO

MILMAN, F. S.; HAUSER, P. R.
DEPARTAMENTO DE FÍSICA DA UFSC

Em trabalhos recentes o estudo do efeito da modulação sobre o mapeamento quadrático através da modulação do parâmetro "a" por uma lei idêntica ao mapeamento já foram realizados e mostraram que o efeito de modulação não altera o comportamento do mapeamento quadrático. Neste trabalho estudamos a influência da modulação do parâmetro "a", através de uma dinâmica proposta por

$$a_{t+1} = 1 - \mu |a_t|^2,$$

sobre o mapeamento quadrático na forma

$$x_{t+1} = 1 - a_t x_t^2.$$

verificamos que para certos valores da modulação "z" ocorrem mudanças qualitativas notáveis nos diagramas de bifurcações, sendo que para valores em torno de "z = 3" o período um se desdobra em dois e a medida que

o expoente de modulação "z" cresce o "gap" aumenta. Ocorre também um alargamento das janelas periódicas e um deslocamento no sentido crescente do parâmetro μ . A influência no comportamento universal é analisada pelos valores dos expoentes de Lyapunov e nas dimensões dos atratores estranhos.

Teoria Estatística de Líquidos, Sólidos e Estruturas Fractais (EST) - 10/06/94

PHASE TRANSITION TO A FROZEN GLASS STATE AND MAGNETIZATION OF C_{60} AND C_{70} FULLERENES

BUNTAR, V.
CIFMC, UnB

The transition to a frozen rotation movement state in C_{60} and C_{70} fullerenes is discussed. The influence of the transition on a magnetic susceptibility χ of the substance is considered. The magnetic susceptibility of a fullerene molecule is a result of a sum of two main contributions: i) paramagnetic currents in every pentagons, and ii) diamagnetic currents flowing all around the molecule. In this work is shown that a strong anomalies have to exist on a $\chi(T)$ dependence on a transition boundary to a frozen glass state. The strong magnetic irreversibility for zero field cooled and field cooled curves in a temperature region $T \leq T_g$ (T_g is a transition temperature) and a extremum at $T = T_g$ on a zero field cooled curve are predicted. The irreversibility due to the difference in the magnetization of the magnetically ordered (for field cooled) and disordered (for zero field cooled) molecules. And the extremum is the result of a thermal "melting" of the frozen glass in the existance of external magnetic field.

MODELO DE DINÂMICA CELULAR PARA REDES DE OSCILADORES

MASSUNAGA, M. S. DE O.; BAHIANA, M.
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Numa grande população de osciladores que interagem entre si, o comportamento macroscópico não deve depender de informações microscópicas detalhadas de cada oscilador e do seu acoplamento específico com o resto da população. Essas informações, provavelmente, nunca estarão disponíveis e poderão variar em detalhes de um oscilador para outro dentro de uma mesma população. Nesses tipos de problemas, onde detalhes finos são irrelevantes, um modelo baseado num sistema de dinâmica celular (SDC) se adapta muito

bem. Analisamos o comportamento de uma população de osciladores em redes bidimensional e tridimensional, usando o SDC, para determinarmos sob que condições há o aparecimento de sincronismo macroscópico numa população de osciladores com uma distribuição específica das frequências iniciais. Tal evolução temporal assemelha-se à transição de fase de segunda ordem em sistemas cooperativos em equilíbrio.

VALIDADE DAS LEIS DE ESCALA PARA O MODELO DE ISING EM UMA REDE FRACTAL

REDINZ, J. A.; MAGALHÃES, A. C. N. DE
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Obtemos expressões exatas para diversas grandezas termodinâmicas do modelo de Ising ferromagnético com campo externo em redes fractais que são generalizações da família Sierpinski Gasket. Partindo dessas expressões calculamos os expoentes críticos ν , α , β e γ associados ao comprimento de correlação, ao calor específico, à magnetização e à suscetibilidade respectivamente. Esse conjunto de expoentes críticos permite testar a validade da lei de escala de Rushbrooke ($\alpha + 2\beta + \gamma = 2$) e da hiper-escala ($d\nu = 2 - \alpha$). Essas leis de escala foram originalmente propostas para sistemas definidos em redes de Bravais. No entanto, a lei de hiper-escala, em particular, tem sido verificada em diversos sistemas fractais (onde d , ao invés de ser a dimensão espacial do sistema é a dimensão fractal da rede). Um teste mais completo envolvendo outras leis de escala, em nosso conhecimento, não fora ainda realizado em um sistema fractal. Nesse trabalho nós verificamos, para redes com diferentes dimensões fractais, que as leis de hiper-escala e de Rushbrooke são válidas para essa família de sistemas magnéticos.

YCl₃ LÍQUIDO : UMA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR

RINO, J. P.
UFSCar

Neste trabalho é proposto um modelo para se estudar as propriedades estruturais do YCl₃ em sua fase líquida, utilizando-se da técnica de dinâmica molecular. A alta ionicidade das ligações do líquido YCl₃ torna tal composto bastante atrativo do ponto de vista da simulação pois o sistema pode ser descrito através de um potencial efetivo de pares esfericamente simétrico. Neste trabalho utilizamos um potencial efetivo de pares que tem a mesma forma funcional do potencial de pares já utilizado em outras simulações,(1) qual seja, a interação Coulombica, devido a alta ionicidade dos ions, uma repulsão de curto alcance para balancear a atração entre ions, e uma interação carga-dipolo devido a alta polarizabilidade eletrônica dos ânions. Os cálculos de

dinâmica molecular foram feitos para um sistema composto por 432 partículas, 108 Y e 324 Cl, a 1300 K. O fator de estrutura, $S(q)$, é calculado e comparado com os resultados experimentais de difração de neutrons reportados por Saboungi et. alii.(2) em excelente concordância. A função de correlação de pares, fatores de estrutura parciais e distribuição dos ângulos de ligação são também discutidos.

(1) Rino, J.P., Ebbsjo, I., Kalia, R., Nakano, A., and Vashishta, P., Phys. Rev. B47, 3053 (1993), e referências aí citadas.

(2) Saboungi, M.-L., Price, D.L., Scamehorn, C., and Tosi, M., EuroPhys. Lett. 15, 283 (1991).

PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, DINÂMICAS E TERMODINÂMICAS DE UMA CADEIA LINEAR COM ANARMONICIDADE FORTE.

SILVA, J. L. F. DA; RABELO, J. N. T.; ZUBOV, V. I.
Universidade Federal de Goiás

Na Física Estatística da Matéria Condensada os modelos simplificados de menor dimensão, particularmente unidimensionais, são de grande utilidade para o desenvolvimento e verificação das teorias [1]. No presente trabalho o Método Correlativo do Campo Autoconsistente Não-Simetrizado [2,3], desenvolvido com o objetivo de descrever os sólidos anarmônicos é empregado para o estudo do modelo mais simples de cristal anarmônico: Uma cadeia linear monoatômica infinita com interação entre os primeiros vizinhos apenas. As propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas deste modelo são obtidas em forma de expansões de temperatura. Calculamos as distâncias interatômicas, o coeficiente de dilatação térmica e as capacidades térmicas isocórica e isobárica em função da temperatura. O potencial autoconsistente de cada átomo contém termos anarmônicos pares até a sexta ordem. Nesta aproximação obtemos a energia livre da cadeia linear com termos anarmônicos até a terceira ordem em temperatura. Os termos anarmônicos de ordem ímpar aparecem quando calculamos correções da teoria termodinâmica de perturbações. Para os cálculos numéricos concretos utilizamos os potenciais interatômicos de Lennard-Jones e de Morse. Os efeitos anarmônicos e a contribuição das diferentes correções da teoria de perturbações são avaliadas. Os termos de terceira ordem em temperatura aumentam a dilatação térmica da cadeia. Consideramos ainda a influência dos termos anarmônicos de ordem mais alta sobre as capacidades térmicas.

1. G.Leibfried, Gittertheorie der Mechanischen und thermischen Eigenschaften der Kristalle (Springer-Verlag, Berlin, 1955). 2. V.I Zubov, Phys.Stat.Sol. (b), 87, 385 (1978). 3. V.I Zubov and J.N. Teixeira Rabelo, Phys.Stat.Sol. (b) 138, 433 (1986).

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E
DINÂMICAS DE SUPERFÍCIES
SINGULARES DE UM CRISTAL
ANARMÔNICO COM REDE HEXAGONAL
SIMPLES.**

ZUBOV, V. I.; RABELO, J. N. T.; LÔBO, M. P.

Universidade Federal de Goiás

MAMONTOV, I. V.

Universidade Russa da Amizade dos Povos

A Rede hexagonal simples é o modelo mais simples de um Cristal Fortemente Anisotrópico. Ademais, em certas condições o silício [1] forma esta rede. Para o estudo das propriedades atômicas de um cristal anarmônico com rede hexagonal simples usamos o Método Correlativo do Campo Autoconsistente Não-Simetizado [2]. Os resultados dos cálculos de suas propriedades termodinâmicas volumétricas, considerando apenas interações de primeiros vizinhos, foram apresentados no ano passado [3]. Neste trabalho estuda-se as propriedades estruturais e dinâmicas de algumas de suas superfícies singulares. Calcula-se a relaxação da rede, as amplitudes médias quadráticas dos átomos e sua assimetria na vizinhança da face 0001. Na aproximação linear em temperatura aumenta uma distância interplanar em comparação com outros, na aproximação quadrática aumentam duas. As amplitudes de vibração dos átomos crescem nas duas camadas paralelas à superfície. Efeito análogo se verifica nas faces $1\bar{1}00$, porém quantitativamente menor. As propriedades das superfícies $11\bar{2}0$ são avaliadas com base em um modelo simplificado: uma rede hexagonal plana com face $11\bar{2}$. Sua relaxação perto desta superfície tem caráter de monocamadas não-monótono: as distâncias interplanares aumentadas se alternam com as diminuídas, tendendo assintoticamente ao valor volumétrico. Analogamente se comportam as amplitudes de vibrações dos átomos. Discutimos o papel dos efeitos quânticos.

1. A. Neethiarlagarajan, Phys. Rev. B47(1993)487.
2. V.I. Zubov, I.V. Mamontov and N.P. Tretiakov. Int. J. Mod. Phys. B6, 197(1992).
3. J.N.T. Rabelo, M.P. Lobo e V.I. Zubov. XVI ENFMC-resumos, p.144, Caxambu, 1993.

**MOMENTOS DE CORRELAÇÃO
INTERATÔMICA PARA UM MODELO
TRIDIMENSIONAL COM REDE CÚBICA
SIMPLES DE CORPO CENTRADO.**

CARVALHO, M. A.; PASCUAL, M. F.; ROSA, A. L.;

ZUBOV, V. I.

Universidade Federal de Goiás

Aplicando o Método Correlativo Não-Simetizado do Campo Autoconsistente (Cusf) [1,2], obtemos expressões das correlações quadráticas para um modelo tridimensional considerando a primeira ordem da teoria de perturbação. Com exemplos ilustrativos, investiga-

mos os momentos de correlação interatômica de redes cúbica simples e de corpo centrado anarmônicas, utilizando para isto um potencial de curto alcance. Obtemos que as correlações quadráticas para ambas redes são diferentes de zero ao longo da linha x que une e zero ao longo dos eixos y e z, para o caso dos primeiros vizinhos. Estudamos a representação gráfica dos momentos de correlação interatômica em função da temperatura. Concluimos que estas correlações são menores para uma rede cúbica de corpo centrado, onde o número de primeiros vizinhos é 8(oito), se comparadas com as de uma rede cúbica simples, com 6(seis) primeiros vizinhos. Pretendemos investigar as correlações quadráticas para redes cúbicas simples e de corpo centrado para a segunda ordem da teoria de perturbação, onde estimamos que os deslocamentos dos átomos perpendiculares ao eixo x sejam determinados por efeitos puramente anarmônicos assim como também as correlações entre vizinhos mais distantes.

- [1] V.I. Zubov, M.F. Pascual, Izvestia Vuzov, Fisika, 27, No. 6, 67, (1984), (em russo) [2] V.I. Zubov, M.F. Pascual and J.N. Teixeira, Phys. Sol. (b), 175, 331, (1993)

**TEORIA MICROSCÓPICA DA
ELASTICIDADE DE CRISTAIS
FORTEMENTE ANARMÔNICOS**

ZUBOV, V. I.; TRETIAKOV, N. P.

Universidade Federal de Goiás

YUSEF, A.; ORTIZ, J. F. S.

Universidade Russa da Amizade dos Povos

A temperaturas acima da metade do ponto de fusão aproximadamente, a anarmonicidade das vibrações da rede cristalina é forte [1]. Neste caso os termos anarmônicos principais não podem ser considerados como uma pequena perturbação e sim devem ser incluídos na aproximação zero. A energia livre dos cristais fortemente anarmônicos de um sistema cúbico pode ser expressada mediante a energia da rede estática $K_0/2$, a temperatura θ , os coeficientes de força de segunda e quarta ordens K_2 e K_4 e a função $\beta(K_2\sqrt{3/\theta K_4})$ [2], determinada pela equação transcendental

$$\beta(x) = 3x \frac{D_{-2,5}(x + 5\beta/6x)}{D_{-1,5}(x + 5\beta/6x)}$$

onde D_ν são as funções do cilindro parabólico. As primeiras derivadas da energia livre com respeito às componentes do tensor de deformação ϵ dão as equações de estado do cristal fortemente anarmônico, enquanto que as segundas derivadas proporcionam as componentes de seu tensor de elasticidade isotérmico. Foram obtidas também as correções quânticas para estas quantidades e as correções da teoria de perturbações, que contêm em si o efeito das correlações e a anarmonicidade de

ordens mais elevadas. Foram calculadas as propriedades termodinâmicas e elásticas de algumas substâncias com ligação de Van-der-Walls e metálica. Os resultados são comparados com dados experimentais. Discute-se o comportamento de diferentes propriedades nas regiões estável e metaestável, incluindo a vizinhança do limite de estabilidade do cristal superaquecido.

1. M.L. Klein. *J. Low Temp. Phys.* 9,151(1972)
2. V.I. Zubov. *Phys.stat.sol.*(b)87,385,88,43(1978)

Podem os fônons promover ordem isotópica?

GOLDMAN, C.

Instituto de Física, USP

BEREZIN, A. A.

Dept. of Engineering Physics, McMaster University, Canada

Examinamos condições para a ocorrência de separação isotópica em uma cadeia de osciladores harmônicos constituída de duas espécies (com massas m_a e m_b), onde uma delas é identificada como impureza (m_b). Determinamos que tais condições são as mesmas requeridas para a ocorrência de uma transição de fase de condensação em um modelo unidimensional proposto por M.Fisher [*Physics* 3 (1967),255]. No estado de equilíbrio termodinâmico do sistema, as interações entre as impurezas, induzidas pelos fônons, são calculadas e, sob certa aproximação, são convenientemente escritas como uma soma sobre potenciais de muitos corpos ϕ_s , envolvendo s partículas de um "cluster" de impurezas. Mostramos que se $m_b = -m_a$, então $\phi_s \sim -1/s^2$ para s grande. Discutimos sobre a possibilidade deste modelo descrever impurezas tipo buraco em uma superfície e sobre possíveis extensões do espaço de parâmetros do modelo ao considerar uma classe mais geral de hamiltonianas quadráticas.

CÁLCULO DE LACUNARIDADE EM REDES FRACTAIS REGULARES

REIS, F. D. A. A.; RIERA, R.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Partindo da proposta de definição de lacunaridade de Allain e Cloitre⁽¹⁾, calculamos a lacunaridade de algumas redes fractais regulares (Sierpinski carpet e gaskets generalizados) no limite do próprio fractal (rede infinita). Usamos técnicas de contagem de gráficos aplicáveis a qualquer fractal regular⁽²⁾. Obtemos estimativas precisas do parâmetro de lacunaridade⁽³⁾, comparamos nossos resultados com os de trabalhos anteriores e os relacionamos a fenômenos críticos naqueles fractais.

- (1) C. Allain e M. Cloitre, *Phys. Rev.* A44, 3552 (1991).
- (2) F.D.A. Aarão Reis e R. Riera, *Phys. Rev.* A45, 2628 (1992).

- (3) F.D.A. Aarão Reis e R. Riera, *J. Phys. A*, em impressão.

TEORIA CINÉTICA DE GASES POLIATÔMICOS EM CAMPOS MAGNÉTICOS EXTERNOS

FERNANDES, A. S.; KREMER, G. M.

UFPR

Gases poliatômicos submetidos à influência de campos magnéticos externos apresentam uma pequena variação nos valores de seus coeficientes de transporte (viscosidade volumétrica, viscosidade de cisalhamento e condutividade térmica). Além disso, o gás torna-se um meio anisotrópico. Este fenômeno é conhecido na literatura como efeito Senftleben-Beenakker. Neste trabalho desenvolvemos uma teoria cinética para estes gases baseada na equação de Boltzmann e numa combinação dos métodos de Chapman-Enskog e Grad. As moléculas que constituem o gás são modeladas como esferas rígidas e rugosas (modelo de Bryan) de tal forma que a energia total é conservada na colisão destas moléculas. Consideramos a influência do campo magnético externo \mathbf{H} sobre as moléculas do gás através de um termo na equação de Boltzmann que depende do torque $\tau_i = \epsilon_{ijk} \mu_j H_k$, onde μ_j é o momento magnético de uma molécula. Através de 29 campos escalares básicos a dependência dos coeficientes de transporte com o campo magnético é determinada.

TEORIA CINÉTICA PARA MISTURAS DE GASES NEUTROS E IONIZADOS - UM MÉTODO ALTERNATIVO

BEZERRA JR, A. G.

Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná

KREMER, G. M.

Universidade Federal do Paraná

Para determinar as aproximações sucessivas dos coeficientes de transporte de gases monoatômicos e suas misturas utiliza-se, em geral, o método de Chapman-Enskog; neste método, o desvio do equilíbrio da função de distribuição é obtido a partir da solução de uma equação integral derivada da equação de Boltzmann. Outro método adotado é o método de Grad, onde o desvio do equilíbrio da função de distribuição é expresso em termos dos momentos desta e os coeficientes de transporte são obtidos das equações de campo dos momentos por um esquema iterativo. A partir dos métodos de Chapman-Enskog e de Grad é possível desenvolver um método alternativo que combina características dos dois primeiros simplificando-os; neste método alternativo não são necessárias nem a solução da equação integral nem o uso das equações de campo dos momentos. Consoante o método de Grad, o desvio do

equilíbrio da função de distribuição é expresso em termos dos momentos da função de distribuição, enquanto que as equações constitutivas são obtidas diretamente da equação de Boltzmann. O método alternativo é aplicado a uma mistura de gases neutros e a uma mistura de gases ionizados. Em ambos os casos são obtidas as equações constitutivas (leis de Fick, Navier-Stokes e Fourier) para uma teoria linearizada, juntamente com aproximações sucessivas para os coeficientes de transporte; são verificadas ainda as relações de reciprocidade de Onsager.

EFEITOS DAS INTERAÇÕES DIPOLARES MAGNÉTICAS E RKKY EM FILMES FINOS

ARRUDA, A. S. DE

Dep.de Matemática - UFMT

FIGUEIREDO, W.

Dep.de Física - UFSC

ARRUDA, A. S. DE; MAJLIS, N.; SELZER, S.

Inst. de Física - UFF

Estudamos os efeitos das interações dipolares e RKKY sobre as propriedades termodinâmicas e as excitações magnéticas de um filme ferromagnético fino. Calculamos as condições de estabilidade do filme ferromagnético em função do parâmetro da energia dipolar. Consideramos um filme com duas camadas magnéticas apresentando as interações de troca J_{\parallel} dentro de cada camada magnética e J_{\perp} entre as camadas magnéticas. Para distâncias de separação Y da ordem de um parâmetro da rede, teremos apenas os efeitos das interações dipolares. Se por outro lado, Y for da ordem de vários parâmetros de rede, podemos introduzir camadas metálicas entre as camadas magnéticas, sendo que a interação J_{\perp} torna-se indireta, dando origem à interação do tipo RKKY que é estudada na aproximação de campo médio. O filme ferromagnético é bem representado pela hamiltoniana de Heisenberg acrescida dos termos de Zeeman e das interações dipolares. As interações de troca são consideradas isotrópicas e somente entre os primeiros vizinhos, enquanto as dipolares se estendem a todos os spins da rede. Utilizamos o formalismo das funções de Green na aproximação das fases aleatórias (RPA), para as interações de troca e dipolares. A magnetização é calculada autoconsistentemente em função da temperatura, do parâmetro da energia dipolar e em função da espessura (Y) das camadas metálicas que separam as camadas magnéticas.

EFEITO DA ESPESSURA E SUBSTRATO NAS PROPRIEDADES FÍSICAS DE ELÉTRONS SUPERFICIAIS EM FILMES DE HÉLIO

SILVA, L. C. DA; RINO, J. P.

Departamento de Física - UFSCAr

Elétrons na superfície de hélio adsorvidos em um substrato têm despertado um enorme interesse tanto teórico quanto experimental. Além do interesse em se saber a natureza dos estados superficiais, mecanismos de espalhamento na condutividade superficial dos elétrons, elétrons em filmes de hélio é também um sistema ideal para se estudar várias propriedades de um sistema de muitos corpos em duas dimensões. O potencial de interação elétron-elétron é um potencial clássico, central, que pode ser obtido resolvendo-se a equação de Poisson com condições de contorno adequadas. Tem uma forte dependência com a espessura do filme de hélio e do tipo de substrato utilizado. Neste trabalho estamos utilizando a técnica de Dinâmica Molecular para calcular a energia de correlação em função da espessura do filme para diferentes substratos, descrever a transição de fase sólido-líquido e as propriedades estruturais, tais como função de correlação de pares, fator de estrutura e número de coordenação; e propriedades dinâmicas, tais como função de auto correlação de velocidade e densidade de estados vibracionais. O sistema consiste de 100 partículas, as equações de movimento são integradas através do algoritmo de Gear de quinta ordem, e as interações de longo alcance são tratadas pelo método de Ewald.

Suporte financeiro : CAPES

Extensão do Conceito de Números Complexos e sua Aplicação em Fractais.

SANTOS, G. C. DOS; LEITE, K. E. V.

Universidade Federal de Alagoas.

O plano complexo é de especial importância na representação dos conjuntos fractais.

Uma extensão desse plano pode ser obtida por meio da álgebra: $ii = ai + bj$, $ij = \alpha i + \beta j$, $ji = ci + dj$ e $jj = Ai + Bj$, onde i e j são versores independentes e $a, b, \alpha, \beta, c, d, A$ e B , são parâmetros. Em particular, Para $a = \beta = A = 0$ e $B = \alpha = -b = 1$, esta álgebra se resume à dos números complexos, com $i = \sqrt{-1}$ e $j = 1$.

Variando-se os parâmetros a, b, A e B , pode-se obter transformações contínuas a partir do conjunto de Mandelbrot, por exemplo. Estamos estudando como os parâmetros interferem nos padrões obtidos, valores críticos, simetrias, etc.

PROPRIEDADES DINÂMICAS DO MODELO DE HUBBARD 1-D

LUZ, D. M.

UFF

SANTOS, R. R. DOS
PUC-RJ

Estudamos o modelo de Hubbard com correlação entre primeiros vizinhos. Obtemos por diagonalização exata, os mais baixos auto-valores e correspondentes auto-vetores deste sistema, para cadeias de até 16 sítios e diversos valores de preenchimento de banda. Com estas energias e funções de onda podemos calcular facilmente funções de correlação e valores esperados do estado fundamental. Apesar destes cálculos serem restritos a sistemas finitos e pequenos, os resultados são extrapolados para o limite termodinâmico usando 'Finite-Size Scaling'. Vamos apresentar os resultados obtidos, através do método recursivo, para a função de correlação densidade-densidade, para diferentes valores de energia de interação intra-sítio (U), e inter-sítio (V). Discutiremos também a influência da inclusão do hopping correlacionado, neste sistema.

REDES FRACTAIS: VALIDADE DAS LEIS DE ESCALA

SILVA, L. DA

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

CURADO, E. M. F.

Universidade de Brasília

MORGADO, W. A. M.

Massachusetts Institute of Technology

COUTINHO, S.

Universidade Federal de Pernambuco

Em uma família de redes fractais, como por exemplo uma família de redes hierárquicas diamante, consideramos um sistema de spins de Potts a q estados, ferromagnético, na presença de um campo externo. Através de um método desenvolvido por nós, deduzimos relações de recorrência para as magnetizações locais e globais que nos permitem calcular exatamente diversas grandezas termodinâmicas (magnetização, susceptibilidade, calor específico, etc...), assim como seus respectivos expoentes críticos. Este método, em geral, fornece equações acopladas relacionando grandezas termodinâmicas em diferentes hierarquias, possibilitando o estudo destas mesmas grandezas em qualquer temperatura, em particular na temperatura crítica. Apresentamos o comportamento de algumas dessas grandezas e usamos os valores exatos obtidos para os expoentes críticos para testar a validade, nestas redes, das leis de escala de Rushbrooke e hiperescala para diversos valores do parâmetro q .

Perfis de Fraturas Bidimensionais

LIMA, I.; MOREIRA, J. G.

Departamento de Física - ICEX - UFMG

BERNARDES, A. T.

Departamento de Física - ICEB - UFOP

Este trabalho consiste em determinar a dimensão fractal (D_f) de fraturas bidimensionais, utilizando amostras de papel rasgado. Acredita-se que o perfil de fraturas tem um carácter de auto-afinidade. A auto-afinidade está relacionada com a anisotropia do perfil, ou seja, o fator de escala depende da direção. Num perfil auto-afim ocorre a relação de escala $W \sim L^\alpha$, onde W é a rugosidade do perfil, L é a largura da fratura e α é o expoente da rugosidade. O método usado para medir a dimensão do perfil é baseado nesse expoente, que tem a seguinte relação com D_f [1]

$$\alpha = 2 - D_f$$

As amostras foram submetidas a uma tensão uniaxial e com velocidade de deformação constante até a ruptura. Em seguida digitalizamos o perfil da fratura e obtivemos a curva que descreve esse perfil. Com os dados digitalizados determinamos a rugosidade do perfil e sua dimensão fractal.

Nossos dados indicam um expoente em torno de $2/3$ levando a uma dimensão D_f por volta de $4/3$. Estes resultados vem reforçar o resultado obtido por Kertész et al [2] que verificaram que todos os expoentes encontram-se no "range" de $0.63-0.72$. Eles conjecturam que esses resultados indicam uma universalidade do expoente α , porém nós achamos que é muito cedo para garantir essa conclusão.

Nós ainda pretendemos utilizar amostras de papel fibroso e papel umedecido. Pretendemos, também, variar a velocidade de deformação das amostras e verificar qual a influência desses fatores na D_f e consequentemente no expoente da rugosidade.

[1] - J. G. Moreira, J. Kamphorst Leal da Silva and S. Oliffson Kamphorst, *On the Fractal Dimension of Profiles*, pré-publicação, (1994).

[2] - J. Kertész, V. K. Horváth and F. Weber, *The Shape of Tear Lines of Paper Caused by Tensile Stress*, pré-publicação, (1993).

Flutuações intermitentes em fragmentação com inativação

MACHADO, R. F.; SILVA, J. K. L. DA

UFMG

Estudamos a fragmentação unidimensional com consumo de massa e inativação, usando as equações de taxa para o caso discreto. Os sítios são consumidos a uma taxa constante e os clusters são inativados com

uma taxa b_s . Obtemos soluções exatas para os casos em que b_s é constante ou proporcional ao tamanho do cluster. Para o segundo caso, a distribuição $n(s) \sim s^{-1}$ de fragmentos inativados em $t \rightarrow \infty$ é uma clara indicação de intermitência. Através de simulações avaliamos os momentos fatoriais $F_q(l)$. O comportamento $F_q(l) \sim l^{-\phi_q}$ por nós obtido para o caso $b_s \sim s$, indica a presença de flutuações intermitentes no processo de fragmentação com inativação. O expoente ϕ_q fornece a dimensão do fractal associado ao q -ésimo momento através da relação

$$d_f(q) = 1 - \frac{\phi_q}{q-1}.$$

O produto final é portanto um multifractal cujo espectro $f(a)$ depende de b_s .

Fase Vidro de Spin no $Fe_xZn_{1-x}F_2$.

RAPOSO, E. C. P.; COUTINHO-FILHO, M. D.;
MONTENEGRO, F. C.
UFPE

O antiferromagneto Ising $Fe_xZn_{1-x}F_2$ é um composto isolante com estrutura cristalina do tipo bcc e interações de troca de curto alcance. Em um campo aplicado o sistema apresenta um cruzamento [1.(a)] de um comportamento típico de campo aleatório ($0.4 < x < 1.0$) para uma fase Vidro de Spin ($0.1 < x < 0.3$) [1.(b)]. A estrutura bcc não frustrada possui uma concentração de percolação geométrica $x_p = 0.24$. O papel da pequena interação frustrada intra-subrede presente no FeF_2 tem sido considerado [2] a priori não essencial para explicar o comportamento perto de x_p . Nós apresentamos evidências numéricas a partir de uma simulação de campo médio sítio a sítio que mostram que mesmo uma pequena frustração tem um importante papel para médias e fortes diluições. Em particular, para $x = 0.25$ e $H = 0$ é mostrado que o sistema tem magnetização de subrede praticamente nula porém parâmetro de ordem de Edwards e Anderson diferente de zero, apenas na presença de frustração.

[1.(a)] F.C.Montenegro et al, J.Appl.Phys.67, 5243 (1990); Phys.Rev.B 44, 2155, 2161 (1991); (b)Europhys. Lett. 8, 383 (1989).
[2]V.Jaccarino e A.R.King in "New Trends in Magnetism", eds. M.D.Coutinho-Filho e S.M.Rezende(World Scientific,1990).

Criticalidade e *Scaling* em Vidros-de-Spins de Ising com Interações de alcance finito.

NOGUEIRA JR, E.; COUTINHO, S.; ALMEIDA, J. R.
L. DE
Universidade Federal de Pernambuco, Recife.
CURADO, E. M. F.
International Centre for Condensed Matter Physics,
Brasília.

NOBRE, F. D.

Universidade Federal do Rio Grande do Norte.

As propriedades críticas e de *scaling* do modelo de vidro-de-spins de Ising com interações de alcance finito foram estudadas na aproximação de Migdal-Kadanoff. Para uma distribuição Gaussiana simétrica o parâmetro de Edwards-Anderson (EA) local do modelo, na correspondente rede hierárquica, apresenta uma estrutura multifractal. Esta característica multifractal persiste mesmo para temperaturas abaixo do ponto crítico, ao contrário do que ocorre para o caso puro (ferromagnético). O estudo das propriedades multifractais da fase vidro-de-spins foi ampliado para abranger regiões do diagrama de fase correspondentes a diversas distribuições não simétricas. Efeitos sobre a estrutura multifractal causados por danos introduzidos na distribuição de acoplamentos original de uma amostra fixa foram, também, calculados e analisados. Os expoentes críticos e de *scaling* do parâmetro de ordem EA e da magnetização local foram estimados e discutidos, no contexto da aproximação usada, à luz de suas características multifractais.

NUMERICAL SIMULATIONS OF ALKALI-DOPED FULLERENES USING A SIMPLIFIED 12-SITES MODEL FOR THE BUCKYMOLECULE.

MARTÍNEZ, G.

Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, Brasil
GAMBA, Z.

Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires,
Argentina

We have done numerical simulations using small clusters of 108 atoms with composition K_nC_{60} for $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ at room temperature by employing a simplified intermolecular potential model of 12 carbon sites instead of 60 positions for each molecule. The calculations were done at the National Supercomputer Center in Porto Alegre using a Cray Y-MP2E/232. The complete series of simulations seems to stabilize in the already detected crystalline structures with the possible exceptions of K_2C_{60} and K_5C_{60} . The analysis of the results reveals that this model is appropriate for statistical purposes in a larger scale including order parameter predictions and transitions to disordered phases. This work is partially financed by FAPERGS.

ESTUDO ENVOLVENDO ANALOGIAS MECÂNICAS NO FERROELÉTRICO RBH3(SEO3)2

COSTA, V. C.; GADELHA, A. L.; VASCONCELOS, D.
S. D.; RIBEIRO FILHO, A.
UFBA

O $\text{RbH}_3(\text{SeO}_3)_2$ é um material ferroelétrico incomensurável, caracterizado por um parâmetro de degenerescência $n=4$ (potência do termo umklapp no funcional de energia livre), o qual, apresenta um ponto de Lifshitz, quando da aplicação de um campo elétrico. O objetivo do presente trabalho tem sido estudar analogias mecânicas que envolvem os cálculos de algumas propriedades físicas (temperatura, constante dielétrica e outras) nas diferentes fases deste ferroelétrico. As vantagens de tal "approach" facilitam os cálculos analíticos, além de permitir uma visão qualitativa que proporciona a visualização de novos aspectos físicos. Outros cálculos estão sendo realizados a fim de se conseguir implementar os resultados já obtidos.

Structure of the ferric/ferrous ions shell in infinitely dilute aqueous solutions

QUINTALE JUNIOR, C.; DEGRÈVE, L.

Departamento de Química, FFCLRP-USP

QUINTALE JUNIOR, C.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

The structure of the solvation shell of the ferric and ferrous ions in infinitely dilute aqueous solution was elucidated by means of the radial distribution functions for the pairs ion-atoms of the water molecules, the angular-radial distribution functions for the Euler angles of the water molecules as functions of the distance to the ion and the azimuthal angles frequencies for three water molecules in the solvation shell. These functions were obtained by NpT Monte Carlo simulations conducted in systems constituted by one ion and TIP4P water molecules at 298K and 1 atm. The orientations of the water molecules in the first solvation shell present the greatest frequency for the angles between the vector ion-oxygen atom and the dipole vector or the vector defined by the two hydrogen atoms respectively near to 15 and 90°. The first solvation shell is constituted by six water molecules presenting a clear structure for groups of three water molecules, with azimuthal angles near to 180 and 90°.

CNPq-Fapesp

MULTIFRACTALIDADE DE SEQUÊNCIAS DE FIBONACCI GENERALIZADAS

FREITAS, A. D.; COUTINHO, S.

Universidade Federal de Pernambuco, Recife.

As propriedades multifractais de uma extensa classe de sequências de Fibonacci generalizadas com um parâmetro de controle foi estudada. Esta classe de equações de recursão, constituída por um conjunto infinito de sequências similares à sequência de Fibonacci

original, apareceu, pela primeira vez, no estudo da magnetização local do modelo de Ising usando-se a abordagem do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff [1]. O conjunto de números gerados por todas essas sequências quando apropriadamente arrumados sobre o intervalo $[0,1]$ fornecem o perfil da magnetização local do modelo de Ising em redes hierárquicas à temperatura crítica. Esse conjunto quando normalizado é uma *medida fractal*. A função $F(\alpha)$ desta medida foi numericamente calculada e discutida. Os valores de α caracterizam conjuntos gerados por uma particular sequência com condição inicial arbitrária. Os valores exatos de α_{min} e α_{max} do espectro multifractal são calculados analiticamente. Para um valor particular do parâmetro de controle o conjunto gerado por sequências de Fibonacci originais ocorre e estas divergem com o expoente α_{min} [2]. Observamos, também, que a razão entre os valores locais de dois perfis consecutivos geram os chamados *números de Farey*.

[1] W. A. M. Morgado, S. Coutinho e E. M. F. Curado, J. Stat. Phys. 61, 913, (1990); Rev. Bras. Fis. 21, 247, (1991). [2] S. Coutinho e A. Freitas, Fractals, 1, (3), 694, (1993).

OSCILADOR COM MASSA DEPENDENTE DO TEMPO INTERAGINDO COM UM RESERVOIR

MARCHIOLLI, M. A.

Instituto de Física Teórica - UNESP

MIZRAHI, S. S.

Departamento de Física - UFSCar

Realizamos o estudo de um Hamiltoniano fenomenológico, obtido da comparação das equações clássicas de movimento para um sistema dissipativo com a inclusão de uma força externa $F(t)$ aleatória, quando consideramos os diferentes formalismos de Newton e Hamilton da Mecânica Clássica. O processo de quantização se faz através das variáveis canônicas Q e P , ou seja, $[Q, P] = i\hbar$. Deste modo, o Hamiltoniano resultante é uma generalização do Hamiltoniano de Bateman-Caldirola-Kanai (BCK) interagindo com um *reservoir*, onde assumimos que o caráter aleatório da força externa seja de natureza Markoviana. As soluções analíticas das equações de Heisenberg para o sistema são obtidas, o que nos permite realizar uma análise do processo de perda(ganho) de energia para diferentes situações físicas. Também calculamos as variâncias dos operadores posição e momentum físicos, onde verificamos o fenômeno de *squeezing* no espaço de fase quântico.

INSTRUMENTAÇÃO

Workshop: Irradiação de Alimentos -
08/06/94

IRRADIAÇÃO DE ALIMENTOS

CAMPOS, J. L.

Coordenação de Gerências de Projetos, CDTN, Comissão Nacional de Energia Nuclear

A utilização de radiações ionizantes como processo de conservação e desinfestação de alimentos vem sendo estudada há muitas décadas, já podendo ser considerada como uma técnica dominada e prestes a ser amplamente utilizada para fins comerciais a nível mundial. Presentemente, mais de 30 países já permitem o consumo de alimentos irradiados, já existindo cerca de 50 irradiadores de alimentos operando em bases experimentais ou comerciais. A maior e mais avançada instalação para irradiação de alimentos, o Vindicator, localizada na Flórida - EUA, foi construída pela iniciativa privada ao custo de 6,8 milhões de dólares e deverá ser o marco mais importante para o estabelecimento definitivo desta técnica, em bases empresariais. Para analisar este assunto em escala regional, o CDTN - "Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear" - está iniciando um estudo visando determinar as possibilidades e conveniências de se implantar um irradiador de alimentos e outros produtos no estado de Minas Gerais. Este estudo deverá contar com a participação de outras entidades e, neste sentido, estão sendo preparados acordos de cooperação com a Escola Superior de Agricultura de Lavras - ESAL e com a Secretaria de Estado de Agricultura, Pecuária e Abastecimento de Minas Gerais - SEAPA. A viabilidade da implantação de um irradiador deverá ser demonstrada através de estudos específicos, a serem realizados junto a empresários e grupos interessados que analisariam o problema dentro de suas próprias condicionantes, tais como disponibilidade financeira e condições mercadológicas. Já existem indícios da viabilidade técnica e econômica de um empreendimento deste tipo que, a título de exemplo, seria munido de uma fonte de 130 kCi de Co-60, podendo processar até 50.000 toneladas de alimentos a um custo inferior a 30 US\$/tonelada, a uma dose de 0.3 kGy. Já se pode antecipar que os maiores problemas seriam relativos à viabilidade financeira e social já que, além das previsíveis dificuldades na captação dos recursos necessários, da ordem de 1.5 a 3 milhões de dólares, deverá ser realizada uma ampla campanha de esclarecimento do público quanto ao real significado e benefícios da irradiação de alimentos.

IRRADIAÇÃO DE ALIMENTOS

WIENDL, F. M.

CENA - Piracicaba

Na irradiação de alimentos atualmente se utilizam equipamentos semelhantes aos destinados a desinfecção e esterilização de equipamentos médicos, onde se obedecem a rígidos sistemas de segurança. A ionização, obtida por equipamentos como as fontes de Cobalto-60, Cesio-137, Raios-X e aceleradores de elétrons, tem uma série de aplicações na área de preservação de alimentos. E todas estas aplicações são fruto de um aumento de energia induzida em átomos e moléculas nos alimentos ou organismos que contaminam estes produtos. Este estado energético mais elevado faz com que haja maior reatividade química, de maneira semelhante ao calor. Algumas moléculas se dividem e os seus fragmentos resultantes podem se recombinar ou reagir de diversas maneiras, um fenômeno que se processa inclusive nos microorganismos que estão presentes nos alimentos. As novas moléculas formadas tem constituição semelhante as outras que já formam os alimentos não irradiados ou processados por outros métodos há muito consagrados. Embora a formação de novas moléculas por irradiação ocorra desde os primórdios do universo, um "excesso" chega a ser prejudicial aos organismos vivos., levando inclusive a sua morte. Doses relativamente baixas são suficientes para impedir a reprodução dos insetos, inativar parasitos e microorganismos. Neste caso, dependendo da dose, há aumento da "vida de prateleira" dos alimentos tratados, chegando-se inclusive a esterilizar produtos alimentares que tem sua conservação garantida por muitos anos, sem a necessidade do uso da refrigeração. A maioria das frutas e vegetais irradiados com doses suficientes para eliminar os insetos tem como vantagem adicional o prolongamento da sua vida pós-colheita. Porém, doses mais elevadas podem induzir propriedades indesejadas, como descoloração, mudança de textura, etc. Para se evitar estes inconvenientes existe a tecnologia de se utilizar processos conjuntos, tais como o frio, o calor, certos gases inertes, etc, em conjunto com a irradiação. No Brasil,

como em todos os outros países do mundo, alimentos como frangos, carnes, peixes, camarões etc, sempre se apresentam contaminados por bactérias e parasitas, muitos causadores de doenças. Uma tecnologia que utiliza o frio, inclusive congelamento em combinação com a irradiação é capaz de eliminar sem dificuldade estes microorganismos. Às vezes um pré-aquecimento é necessário para inibir a ação de enzimas que chegam a modificar a textura e o sabor durante a armazenagem após a irradiação. Atualmente, a utilização da ionização pode ser didaticamente classificada nos seguintes itens:

1. Radiodesinfestação, destinada a eliminar principalmente pragas (insetos) com doses entre 100 e 1000 Gy.
2. Radicização ou Radiopasteurização, com objetivo de eliminar organismos tais como triquinias solitárias, cisticercos e salmonelas, utilizando doses entre 1000 e 10000 Gy.
3. Radurização, objetivando diminuir com doses semelhantes a radicização microorganismos existentes em carnes, peixes, lagostas, frango, etc.
4. Radapertização ou Radioesterilização, utilizam-se de altas doses de 70 kGy, a fim de eliminar agentes patogênicos de carnes, lingüiças, camarão, etc, inclusive refeições completas destinadas à alimentação de astronautas e pessoas que sofrem de imunodeficiências.

De qualquer maneira vale a pena destacar que existem alimentos que, após irradiados, não tem problemas de aceitação, quer sejam tratados com doses baixas ou elevadas. Em alguns poucos alimentos, as pesquisas não conseguiram obter resultados favoráveis quanto a sua palatabilidade, firmeza ou coloração. Estes deverão ser tratados com processos combinados, tanto para diminuir efeitos indesejados como inclusive estudando-se as possibilidades de diminuir custos operacionais.

IRRADIAÇÃO DE ALIMENTOS

ROCHA, A.

Cia. Brasileira de Tecnologia Nuclear

Instrumentação I (INS) – 08/06/94

PROJETO E CONSTRUÇÃO DE UM ANALISADOR DE VELOCIDADES DO TIPO MÖLLENSTEDT

LISBOA FILHO, P. N.; BARBIERI, R. S.
Universidade Federal de São Carlos

O objetivo principal deste trabalho é a projeção e a construção de um analisador de velocidades do tipo Möllenstedt que deverá ser empregado em experimentos de espectroscopia por impacto de elétrons de alta energia (> 1KeV) em laboratório a ser implantado no DF-UFSCar. O analisador, cujo desempenho é função direta de seus parâmetros geométricos, é constituído por 3 eletrodos (lentes) paralelos entre si e dotados de um eixo comum. Os eletrodos externos são aterrados, enquanto o par central é alimentado por um potencial negativo, para o caso de se analisar elétrons. Através de um estudo sistemático, a dispersão, a resolução e a posição da cáustica, foram investigadas como função dos seus parâmetros geométricos, bem como das voltagens aplicadas nos eletrodos centrais e da energia dos elétrons incidentes no sistema. Para tal, simulações das linhas equipotenciais associadas aos elementos(lentes) do analisador e as trajetórias de feixes eletrônicos (com

energia incidente de 1 a 30 KeV), sob a influência de tais linhas, foram realizadas utilizando-se o pacote computacional SIMION. Os parâmetros geométricos propostos por Tian Fink [1] bem como os fornecidos por Metherell Whelan [2] foram utilizados como referência. Projeto financiado pela FAPESP

- [1] R. Tian M. Fink, Rev. Sci. Instrum. 58.1450(1987)
[2] A. F. Metherell, M. J. Whelan, J. Appl. Phys. 37, 1737 (1966)

CONSTRUÇÃO DE UM DISPOSITIVO, UTILIZANDO DESCARGA EM CATODO OCO, PARA ESTUDO DO ACOPLAMENTO COLISIONAL ENTRE OS NÍVEIS $^2P_{1/2}$ E $^2P_{3/2}$ DO ÁTOMO DE COBRE.

CHRIST, B.

CTA/ITA – São José dos Campos – SP
RODRIGUES, N. A. S.; SCHWAB, C.
CTA/IEAv – São José dos Campos – SP

Foi projetado e construído um dispositivo de descarga em catodo oco, utilizando Cobre como material dos eletrodos, para o estudo do acoplamento colisional ("Collisional Mixing") entre os níveis $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$ do átomo de Cobre. Foram utilizados dois tipos de gás tampão: Hélio e Argônio. Com Hélio o dispositivo operou a uma

pressão de até 170 torr e com Argônio a uma pressão de até 160 torr, nessas pressões foram observadas, através de uma fotomultiplicadora acoplada a um monocromador, as intensidades das linhas de 5782 e 5106 Å (amarelo e verde) correspondentes às transições entre os níveis $^2P_{1/2} \rightarrow ^2D_{3/2}$ e $^2P_{3/2} \rightarrow ^2D_{5/2}$, respectivamente. Pretende-se bombear a descarga com uma das linhas de emissão de um Laser de Vapor de Cobre (LVC), 5106 ou 5782 Å, e através da monitoração das intensidades das linhas, emitidas pela descarga em ctodo oco, poderemos verificar e medir o acoplamento colisional entre os níveis $^2P_{1/2}$ e $^2P_{3/2}$ do átomo de Cobre.

PRIMEIROS RESULTADOS DA LINHA DE LUZ COM MONOCROMADOR DE GRADES TOROIDAIS

FONSECA, P. DE T.; PACHECO, J. G.

LNLS

GRAEFF, M. S. Z.; FRAGUAS, G. B.; CASTRO, A. R. B. DE

LNLS e IFGW-UNICAMP

MORIKAWA, E.

CAMD/LSU Baton Rouge LA USA

Essa linha de luz consiste dos equipamentos óticos e de controle para condicionar luz síncrotron na faixa espectral de 12 a 310 eV. A parte ótica, de incidência rasante, compreende um espelho côncavo toroidal que projeta a imagem da fonte na fenda de entrada do monocromador, grades toroidais de difração para dispersar espectralmente a luz, e um segundo espelho côncavo toroidal que projeta a imagem da fenda de saída na amostra a ser iluminada. A linha funciona sob condições de ultra alto vácuo (pressões da ordem de 10^{-10} mbar). Foi projetada e construída no LNLS, instalada temporariamente no anel de armazenagem de elétrons da Universidade da Louisiana (Baton Rouge, USA) e vem sendo operada desde Nov 1992. Utilizando equipamentos auxiliares simples, foram feitas medidas de fluxo de fótons para cada uma das três grades toroidais de difração, estimativas de resolução espectral, medidas de contaminação harmônica em comprimentos de onda selecionados, e calibração absoluta da escala de comprimento de onda do monocromador. Como aplicações, foram feitas medidas de photo-electron yield em amostras monocristalinas de Si, InP e Be. A posição dos picos de absorção coincide com dados da literatura, confirmando a calibração da escala de comprimento de onda do monocromador. O equipamento também foi utilizado por usuários externos para medidas da superfície de Fermi do cobre via técnica de espectroscopia de fotoelétrons com resolução angular e estará sendo usado em 1994 por vários outros grupos de pesquisadores.

STATUS PRESENTE DA LINHA DE LUZ COM MONOCROMADOR DE GRADES ESFÉRICAS

GRAEFF, M. S. Z.; CASTRO, A. R. B. DE;

FRAGUAS, G. B.

LNLS e IFGW-UNICAMP

FONSECA, P. DE T.

LNLS

O LNLS projetou e está construindo uma linha de luz com monocromador de grades esféricas de difração, para a faixa espectral 250 - 1000 eV, e poder resolutivo E/dE superior a 3000. Muitos elementos desse equipamento são semelhantes aos já testados na linha TGM. O monocromador, entretanto, implicou em desenvolvimento original. No monocromador, as grades de difração são mantidas fixas dentro da câmara de ultra alto vácuo, sendo a câmara inteira girada sobre um curso angular total de 2.5 graus para selecionar o comprimento de onda. O efeito dos torques devidos aos acoplamentos flexíveis de vácuo e outros fatores periféricos foram estudados: eles levam a grandes flexões da haste de acionamento da câmara, dependentes da posição angular. Para cancelar erros na estimativa da posição angular, um interferômetro ótico foi acoplado diretamente a câmara rotativa, o que permite codificação absoluta do ângulo de inclinação da câmara, com precisão de alguns microradianos. Essa precisão é da mesma ordem que a tolerância na qualidade da superfície esférica das grades, o limitante no poder resolutivo atingível. O esquema de contagem de franjas sendo usado no LNLS permite resolução de uma franja, podendo, em princípio, ser melhorado para resolução de 1/4 de franja. A literatura descreve esquemas com resolução de até 1/256 de franja. Os testes mecânicos já feitos no mecanismo do monocromador e seus acessórios de suporte e ajuste indicam que o sistema precisa ser montado sobre um piso de muito maior estabilidade que o presentemente disponível. A turbulência do ar na sala quando o sistema de ar condicionado está ligado também degrada o desempenho do interferômetro.

COMPONENTES DE UHV DESENVOLVIDOS NO LNLS PARA LINHAS DE LUZ

PACHECO, J. G.; KRUGER, E.; PICOLI, R. A.;

FONSECA, P. DE T.

LNLS

BAGNATO, O. R.

LNLS e FEM-UNICAMP

CASTRO, A. R. B. DE

LNLS e IFGW-UNICAMP

Uma "linha de luz" é o conjunto de componentes necessários para condicionar e levar até a amostra o feixe

de luz síncrotron. Como não há materiais sólidos transparentes na região espectral 12 - 5000 eV, toda a instrumentação deve operar no mesmo vácuo do anel de armazenagem, a pressões da ordem de 10^{-10} mbar. Foram desenvolvidos muitas partes e processos para as linhas de luz e para o anel de armazenagem de elétrons. Os bloqueios de fótons do front-end foram redesenhados. A versão anterior tinha uma câmara retangular de difícil construção. A montagem dos elementos internos também era trabalhosa. As novas versões usam câmaras cilíndricas e componentes modulares com fácil acesso a todos os parafusos das partes de UHV e do sistema de acionamento pneumático. Construiu-se uma câmara de espelho, refrigerada a água, para o espelho toroidal da linha de luz TGM temporariamente instalada no anel de armazenagem da Universidade da Louisiana (Baton Rouge, USA). Esse espelho receberá uma carga térmica de cerca de 80 Watts quando o anel de armazenagem estiver operando a plena potência. A construção desta câmara implicou em delicada brasa-gem a vácuo entre peças de aço inox e cobre. Está instalada e em operação desde Outubro de 1993. Replicou-se a câmara de medidas da linha TGM, para usá-la em outras estações experimentais. A montagem desta câmara é feita com gabaritos especiais que garantem o alinhamento dos portos dentro de erro inferior a 0.5 grau. Após recozimento a 150 C, a pressão interna cai na faixa de 10^{-10} mbar. Uma das cópias será usada em experimentos de fluorescência de raios-X moles, e a outra em uma estação de foto-emissão.

UM MAGNETÔMETRO DE GRADIENTE DE CAMPO DE FÁCIL CALIBRAÇÃO.

VIEGAS, A. DA C.; HAETINGER, C. M.; SCHMIDT, J. E.
 IF - UFRGS
 CARARA, M.
 Depto. de Física - CCNE - UFSM

Este trabalho descreve um tipo de magnetômetro com uma sensibilidade da ordem de 10^{-7} emu, adequado para o estudo de filmes finos. O magnetômetro proposto é uma adaptação do trabalho original de P. J. Flanders (*J. Appl. Phys* 63, 3940 (1988)). A amostra magnética, montada na extremidade de um sensor piezoelétrico, sofre a ação de dois campos magnéticos: (i) um campo DC de magnitude variável e superposto a esse (ii) um outro AC que produz um gradiente de campo. O campo alternado exerce uma força na amostra, também alternada, cuja intensidade é proporcional ao campo AC e o momento magnético da amostra. A força exercida sobre a amostra é transmitida ao sensor piezoelétrico que por sua vez gera um potencial proporcional à deflexão na amostra. Esse sinal deve ser amplificado sincronamente com o campo AC, a fim de se obter uma curva de histerese do material sob análise.

Como a frequência de ressonância mecânica do sistema suspenso (amostra, extensão de quartzo e elemento piezoelétrico) tem forte dependência com massa do conjunto, a calibração final do magnetômetro, em emu/V, é dificultada. Para resolver esse problema foi montado no sistema, na extremidade oposta ao sensor, uma bobina de dimensões conhecidas. Quando for aplicado uma corrente, a bobina vai gerar um momento magnético proporcional à corrente, fornecendo portanto uma calibração para o magnetômetro, nas mesmas condições de medida da amostra.

AUTOMAÇÃO DE UM SUSCEPTÔMETRO AC AUTO-BALANCEADO.

SOUZA, R. R. DE; PAGNANO, M. A. DE O.; MAGON, C. J.
 IFQSC-USP

Após o desenvolvimento e construção do susceptômetro AC auto-balanceado^a, o qual realiza medidas, entre 4K e 300K, das componentes real(χ') e imaginária (χ'') da susceptibilidade magnética, está sendo desenvolvido, agora, a automação do mesmo. Esta automação está sendo realizada de duas maneiras: Interface com um microcomputador PC-XT; desenvolvimento e construção de um controlador lógico programável (PLC). O PLC consiste de uma placa controladora programável por um teclado de 16 teclas e conectada a um visor de cristal líquido. Esta placa possui 8 entradas analógicas acopladas a um conversor A/D (conversão em 15 μ s); 48 bits de entrada ou saída; e permite o armazenamento de até 64K bytes de dados em memória RAM, que podem ser transferidos para um microcomputador através de uma interface serial (padrão RS232). Com esta automação será possível realizar medidas mais rápidas, realizando promediações a fim de melhorar a relação sinal ruído e, conseqüentemente, a precisão das medidas.

^aSouza,R.R.de; Magon,C.J. XV-ENFMC, resumo p.206, Caxambu, MG, 5-9 maio 1992.

MEDIDAS DE CALOR ESPECÍFICO PELO MÉTODO DE RELAXAÇÃO TÉRMICA

AZECHI, L. S.; GANDRA, F. C. G.
 Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP-IFGW

Desenvolvemos um método preciso de medidas de calor específico em amostras pequenas (da ordem de 10 a 100 mg) baseado no fenômeno de relaxação térmica. Tal método consiste basicamente em aquecer uma amostra e observar o tempo necessário para que ela volte ao equilíbrio térmico com a sua vizinhança. Dessa observação, e conhecendo a potência utilizada no aquecimento, determinamos a capacidade térmica da amostra e portanto, dividindo pela massa, o seu calor específico. A amostra é presa a uma lâmina resistiva

de NiCr que, por sua vez, tem soldados nas suas extremidades quatro fios finos de cobre, ancorados termicamente a um reservatório de calor, que levam corrente e medem a tensão na lâmina (determinando assim a potência). O calor dissipado eleva a temperatura do conjunto amostra+substrato (lâmina+fios+etc) até se atingir o equilíbrio térmico. Desliga-se então a corrente e observa-se a queda (exponencial) da temperatura do conjunto com relação ao reservatório térmico utilizando-se um termopar Au-Fe(0.07%)-cromel. Determina-se assim a capacidade térmica total, ou seja, a da amostra+substrato; aplicando o método apenas ao substrato determinamos sua capacidade térmica e conseqüentemente também a da amostra. O sistema todo, amostra+substrato+reservatório térmico, é envolto por um shield metálico, acoplado a um suporte de aço inox e inserido em um criostato de hélio. Através de um sensor de carbon-glass, colocado no reservatório de calor, e de um heater, enrolado no shield, um controlador de temperatura permite medirmos calor específico em função da temperatura. Os dados são adquiridos por um computador através de uma interface A/D.

CONSTRUÇÃO DE UM FILTRO ESPACIAL

MURAMATSU, M.; ALLAIN, A. R.; KIYOHARA, P. K.
Instituto de Física da USP

Neste trabalho será discutida a aplicação da filtragem espacial para limpar e expandir feixe laser utilizado em vários campos como holografia, processamento de imagens e metrologia óptica. Serão apresentados os princípios de funcionamento de um filtro espacial e as etapas de sua construção mecânica. Ênfase especial será dada na construção dos furinhos (pinholes) com diâmetro entre 15 a 50 microns. Serão apresentados 3 diferentes métodos para a obtenção dos pinholes: 1-Bombardeio com laser pulsado de Nd:YLF. 2-Réplicas de padrões por evaporação de cobre eletrolítico em alto vácuo. 3-Método mecânico utilizando-se de uma microagulha especialmente construída para essa finalidade. Através de micrografias serão mostrados os diferentes furinhos obtidos e serão discutidos a sua adequação para a filtragem espacial e na formação de imagens em microscopia eletrônica.

DETECTOR PROPORCIONAL PARA ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DE ELÉTRONS DE CONVERSÃO

SINI, S. M.; MACCHIONE, E. L. A.; SILVA, N. C. DA; KOIDE, K.; DIETZSCH, O.

Lab. de Instrumentação e Partículas-Inst. de Física da USP

Foi construído um detector proporcional para espectroscopia Mössbauer, que será utilizado para detectar

elétrons de conversão provenientes de amostras (sólidas contendo ferro) situadas em seu interior. Em operação, é mantido um fluxo de gás no detector. Uma mistura de Ar(90%) e CH₄(10%), foi usada para os testes preliminares com raios X de 5,9 keV, fornecidos por uma fonte de ⁵⁵Fe. Para tensões entre 1000 e 1700 V, o detector opera na região proporcional com uma resolução em energia entre 15 e 20%. O detector é composto por 3 flanges de alumínio com 80 mm de diâmetro cada. A flange intermediária, com 15 mm de espessura, contém as conexões de gás e de alta tensão (alimentação do anodo e obtenção do sinal). As outras flanges têm ambas 5 mm de espessura, sendo a primeira com orifício central de 20 mm de diâmetro, por onde incide a radiação através de um filme multicamadas (18 μm de mylar, 9 μm de alumínio e 85 μm de polietileno) de fabricação nacional. A superfície de mylar, voltada para o interior do detector é pintada com uma tinta de grafite para torná-la condutora. A segunda abriga o porta-amostra. O volume efetivo do detector é de 5,9 cm³. Estão em andamento medidas com uma mistura gasosa de He(95%) e CH₄(5%), para determinar o fator de multiplicação, a resolução em energia e o fluxo mínimo de gás para operação estável do detector.

Sistema de Controle de Espectrômetro de RMN sob Windows

RICHA JUNIOR, G.; VALOIS, R.; SARTHOUR, R.; GUIMARÃES, A. P.
CBPF/CNPQ

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma ferramenta muito útil no estudo de metais e ligas magnéticas. Um moderno equipamento de RMN, é composto de vários equipamentos que podem, ou devem, ser controlados por computador, tornando assim uma medida de RMN completamente automática. Com isso foi desenvolvido um programa que controla as partes essenciais do Espectrômetro. Este programa opera sob o ambiente gráfico Windows 3.1 e tem o objetivo de realizar medidas de RMN realizando medidas de Eco (o sinal de RMN), Espectro, T1 e T2 (tempos de relaxação-característicos do fenômeno de RMN). A configuração mínima exigida é um micro padrão IBM PC-AT 386DX com 2 Mb de espaço em disco rígido. Quanto aos equipamentos periféricos existem duas configurações: Configuração 1: Gerador de R.F. → Fluke 6061A (GPIB) Prog. de Pulsos → CERN/CBPF (CAMAC) Digitalizador → LeCroy 8818 (CAMAC) Amplificador → Genérico Modulador/Demod → Genérico (Bruker) Configuração 2: Gerador de R.F. → Fluke 6061A (GPIB) Prog. de Pulsos → CERN/CBPF (CAMAC) Digitalizador → Tek TDS520 A (GPIB) Amplificador → Genérico Modulador/Demod. → Genérico (Bruker)

A importância da automatização dos equipamentos melhora a qualidade das medidas, devido ao aumento do

tempo de duração da medida o que possibilita medir sinais de RMN muito fracos. Estando a experiência em andamento o usuário poderá usar outros programas do micro sem a paralisação da aquisição de dados de RMN. Durante a realização da medida há uma barra de informação na parte inferior da janela que informa o tipo de medida, o arquivo onde os dados estão sendo gravados e o tempo para o seu término. A medida também poderá ser interrompida e armazenada em disco para uma posterior complementação.

Instrumentação Eletrônica para controle e automação de um sistema de Epitaxia por Feixes Moleculares

ARAKAKI, H.; RODA, V. O.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Este trabalho apresenta a instrumentação eletrônica desenvolvida para o controle e automação de um sistema de crescimento de semicondutores por Epitaxia por Feixes Moleculares. Envolve uma variedade de circuitos nas áreas analógica, digital e controle de potência, incluindo:

- Controladores de temperatura analógicos tipo PID, utilizando leitura de temperatura por termopares e circuito de potência com controle de fase.

- Módulo de controle e aquisição de dados baseado em uma UCP Z-80. Esta UCP funciona como um intermediário entre um microcomputador e as interfaces de controle e aquisição de sinais do módulo. A comunicação entre a UCP e o microcomputador é realizada através de uma interface serial padrão RS 232. O microcomputador envia uma série de comandos referentes ao controle das interfaces, os quais são interpretados e executados pela UCP. O módulo foi montado em um bastidor com barramentos de conectores, aos quais além da UCP estão as interfaces por ela controladas:

Interface Analógico/Digital de 14 bits com 8 canais de entrada multiplexados

Interface Digital/Analógica de 12 bits com 8 canais de saída multiplexados

Interfaces de Entrada/Saída digitais

- Atuação por motores de passo controlados por microcomputador

- Circuitos de condicionamento de sinais analógicos e digitais

O controle através de comunicação serial torna o módulo bastante versátil, permitindo o seu controle por qualquer microcomputador que disponha de uma interface serial, e utilizável em uma variedade de aplicações diferentes.

PROPAGAÇÃO DE PULSOS ELÉTRICOS ULTRA-CURTOS EM LINHAS DE TRANSMISSÃO IMPRESSAS UNIFORMES E NÃO-UNIFORMES, COM APLICAÇÕES EM ÓPTICA

VÉLIZ, R. O.; SOUZA, J. R.

CETUC - PUC/Rio

Os significativos progressos obtidos em opto-eletrônica ultra-rápida permitem gerar e detectar pulsos com duração de picossegundos e sub-picossegundos. Tais avanços tem estimulado o projeto e fabricação de circuitos de microondas (MICs, MMICs e HMICs) para uso em sistemas de alta velocidade. Nestas aplicações, as largas bandas envolvidas exigem o rigor de técnicas de onda completa na caracterização dos componentes dos circuitos, geralmente realizados em linhas de transmissão impressas, que não suportam propagação TEM. A simulação da propagação de pulsos elétricos curtos ao longo de linhas de transmissão impressas, uniformes e não-uniformes, oferece uma interessante possibilidade de prever como os pulsos serão distorcidos. Neste trabalho se investiga a propagação de pulsos elétricos curtos, com duração de picossegundos, em linhas de transmissão impressas uniformes e não-uniformes. Primeiramente, a Abordagem de Domínio Espectral (ADE) é usada para rigorosamente determinar a variação da constante de propagação ao longo das linhas, em uma faixa de frequências suficientemente larga. A seguir, um algoritmo baseado na Transformada Rápida de Fourier (TRF) é usado para obter a resposta temporal. As linhas não-uniformes estudadas aqui correspondem a duas estruturas de casamento de impedância: uma linha microstrip afilada e um transformador de impedâncias, ambas com perfil de impedâncias exponencial. É observado que a distorção dos pulsos é devida principalmente à natureza dispersiva das linhas, enquanto a variação gradual da impedância ao longo da estrutura não adiciona distorção apreciável aos pulsos, somente os atenua ligeiramente e introduz um retardo temporal progressivo, devido à diminuição da velocidade de fase à medida que o sinal progride na linha de transmissão. Entretanto, uma variação rápida da impedância - mudando agudamente a seção reta da linha - produz uma degradação maior do casamento e parte do sinal será refletido, atenuando assim a amplitude do pulso transmitido. Obviamente, neste caso o retardo introduzido será também maior. No estudo de linhas de transmissão uniformes é observado que a natureza dispersiva das linhas de transmissão pode ser utilizada com vantagem, através de cuidadosa escolha de sua geometria e composição, para reformar pulsos assimétricos.

AMPLIFICADOR I/V ELETRÔMETRO DE BAIXO CUSTO PARA CROMATOGRAFIA A GÁS

BERTUCCI NETO, V.
EMBRAPA/CNPDA

Foi projetado e construído um amplificador com entrada em corrente e saída em tensão (I/V) com sensibilidade variável de 5pA/V a 1 μ A/V de fundo de escala. Foram colocadas 3 faixas de ganho de sensibilidade (x1, x100 e x10000) com subdivisões de 1, 2, 5, 10, 20 e 50, exceto na faixa x10000 onde vai até 20. A tensão de carga (burden) na entrada é menor que 200 μ V, a exemplo do que se encontra na maioria dos eletrômetros comerciais. Nesta primeira versão desenvolvida, a precisão foi melhor que 1%, o ruído de saída com entrada em aberto foi menor que 200 μ V e três ajustes de zero permitem corrigir eventuais problemas de offset. Os componentes utilizados foram de linha comercial, fazendo baixar os custos do equipamento. A aplicação inicial prevista é para cromatografia a gás, porém pode ser utilizado em quaisquer situações onde se necessite amplificar e medir baixas correntes.

SISTEMA AUTOMATIZADO DE MEDIDAS DE CALOR ESPECÍFICO A BAIXAS TEMPERATURAS

GOMES, A. M. DE S.; NOVAK, M. A.
IF/UFRJ

Descrevemos a automação de um sistema de medidas de calor específico a baixas temperaturas de 1.3 a 30 K, para amostras massivas ou em pó tipicamente de algumas centenas de miligramas. Uma bobina supercondutora possibilita medir na presença de campos magnéticos de até 5 kOe. Adotou-se como método de medida o de pulso quase-adiabático descrito brevemente. Foi desenvolvido um software para aquisição e visualização de dados em tempo real em linguagem Pascal, que pode ser facilmente adaptado a outros sistemas experimentais. O sistema de medidas é descrito desde a parte eletrônica passando pela aquisição em tempo real, processamento dos dados até a apresentação final dos resultados. Com esta automação obteve-se um melhora considerável na precisão das medidas além da redução do tempo de análise dos dados. Como resultado típico apresentamos o calor específico de um composto orgânico de manganês, em que se esperava uma possível transição de fase não confirmada a 3K.

Workshop: Instrumentação Biomédica / Lasers (INS) - 09/06/94

LASER EM ODONTOLOGIA

EDUARDO, C. DE P.

Departamento de Dentística - Universidade de São Paulo

Os últimos cinco anos têm representado um avanço muito grande com relação à utilização clínica do laser em Odontologia. Pesquisadores em países como o Japão, Estados Unidos, França, Inglaterra, Israel e outros, têm trabalhado no intuito de fazer com que o binômio clínica e pesquisa caminhem juntos em termos de laser. Diversos lasers como o CO₂, Argônio, Nd:YAG, He-Ne, Ga-Al-As, e mais recentemente, o Erbium e o Holmium, têm sido pesquisados para a sua utilização em Odontologia. Nas especialidades odontológicas, dentística, endodontia, periodontia e semiologia, o Nd:YAG laser tem-se mostrado um passo a frente como um importante coadjuvante nas diversas intervenções clínicas. Dependendo da energia depositada o Nd:YAG laser, pode cortar, vaporizar ou coagular o tecido. Em dentística restauradora, a remoção de cáries, eliminação da hipersensibilidade dentinária, ataque ao esmalte e redução bacteriana após o preparo cavitário, são obtidos com o Nd:YAG laser. Também em endodontia, tem-se uma redução bacteriana após a aplicação intracanal deste laser. Em periodontia, excelentes resultados são obtidos através da remoção do tecido de granulação pelo laser e sua utilização em gengivoplastia. Podemos ainda citar o grande benefício que o laser traz com relação a sua aplicação em aftas e herpes, o que leva à uma aceleração do processo cicatricial, além de um maior conforto ao paciente. Tendo em mente o grande número de indicações apresentadas pelo laser, uma análise e diagnóstico corretos se tornam primordiais para o sucesso destas intervenções.

INSTRUMENTAÇÃO BIOMÉDICA / LASERS

CHAVANTES, C.
INCOR

**PHOTOCOAGULATION THERAPY OF ONCOGYNAECOLOGY DISEASES WITH A C/W
CO₂ LASER SYSTEM.**

PACHECO, J. S.; PINOTTI, J. A. P.; GURGEL, J.
Rua Duque de Caxias, 1024, 13015-311, Campinas, SP

Since 1974, the use of CO₂-Laser coagulation has been gradually developed as an effective procedure in the performance of precancerous and cancerous lesions of the female genital tract. The patient with various degree of cervical intraepithelial neoplasia (CIN) only or associated with condylomatous lesions and preinvasive cancer of cervix were treated CO₂-Laser. All women were examined by colposcopy (CS), cytology (CT), and histology to evaluate size and grading of the lesion. The mean age of the patients was 30 years. The medical laser systems was used. At three weeks following treatment, patients were submitted to a colposcopic evaluation of healing. Follow up was then performed a 3, 6, 12 months after the treatment by CS, CT and HL. In case of failure treatment, CO₂-LC was repeated. The patients treated, had CIN lesions only, and condylomatous with CIN and pre-invasive cancer of cervix with CIN lesions. After three months in the follow-up some patients had persistence of the lesion. Of these patients underwent a second treatment, while patients with (CIN III + condylomatous lesions) were hospitalized for cold knife conization. At 12 months findings were overlapped to those one obtained at 6 months. These results suggest that laser photocoagulation can be considered an effective therapeutic modality in oncogynaecology.

INSTRUMENTAÇÃO BIOMÉDICA / LASERS

CVINTAL, T.

Hospital Santa Catarina

*Instrumentação Biomédica (INS) -
09/06/94*

**SISTEMA DE DETECÇÃO DE LUZ I.V.
ESPALHADA PELA RETINA PARA
CORREÇÃO DE AMETROPIAS**

VENTURA, L.; CHIARADIA, C.; CASTRO, J. C. DE
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP
SOUZA, S. J. DE F. E
Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

Em um sistema de medidas refrativas oculares para detecção de ametropias utilizam-se feixes de luz I.V. ($\lambda = 830\text{nm}$) incidentes na córnea e detecta-se a luz retro-espalhada pela retina.

Dois métodos de detecção automática da luz espalhada pela retina são apresentados: o primeiro (uma fonte de luz é envolvida) está relacionado a medidas da variação da intensidade da luz espalhada, em que se deseja detectar o ponto de intensidade máxima; o segundo (mais de uma fonte de luz é utilizada) está relacionado à detecção de presença e de ausência de luz (movimento de luz na retina), sem a necessidade de se levar em conta a intensidade de luz espalhada.

Obtém-se maior precisão nas medidas refrativas utilizando-se o segundo método, que proporciona a imple-

mentação de um sistema "inteligente" para que o tempo de medição seja mínimo.

Este método é composto basicamente por quatro fontes de luz (F_1 , F_2 , F_3 e F_4) igualmente espaçadas em relação ao eixo óptico (90° entre si). Os feixes de luz passam por um alvo e são projetados no olho-teste.

As fontes alternam-se entre si. Quando F_1 está ligada, uma imagem I_1 do alvo é projetada na retina. A luz espalhada pela retina é detectada por um detector de quadrante. Um processo análogo ocorre quando as outras fontes são ligadas sequencialmente. Quando uma só imagem for obtida no detector (I_1 e I_2 sobrepostas e, I_3 e I_4 sobrepostas), através do movimento axial do alvo, obtém-se a correção refrativa.

Ainda, utilizando-se estas fontes que se alternam, moduladas em uma frequência de 1KHz e defasadas entre si, é possível determinar o sentido exato do movimento do alvo, introduzindo assim, uma redução no tempo de medição.

Os resultados são bastante satisfatórios: este segundo método apresenta uma precisão de 0,09di (erro permitido: 0,125di) sobre 0,2di de erro introduzido pelo primeiro sistema.

CONTROLADOR DE INFUSÃO ENDOVENOSA MICROPROCESSADO

DINIZ, I. S.; ZÂNGARO, R. A.

UNIVAP - LOPE - São José dos Campos

O presente trabalho tem por objetivo o desenvolvimento de um sistema automatizado para controle e monitoração de infusão endovenosa utilizando equipo convencional. Um microcomputador constituído de um microprocessador 80C85 da INTEL, interface paralela, contador, memória e display de cristal líquido foi desenvolvido especificamente para este fim. O usuário tem opção de programar por meio do teclado: o volume e tempo ou gotejamento e tempo prescrito para infusão do medicamento. Durante o processo pode ser visualizado no display: tempo restante do processo, volume infundido ou interrupção do processo. Um transdutor ótico constituído de um emissor e um receptor infravermelho é utilizado para detecção da passagem de gotas na câmara de gotejamento do equipo. Um sistema mecânico utilizando motor de passo com ângulo de 7,5 graus, um torque de 1000 g.cm, um fuso de 15 mm de comprimento com passo de 0,4 mm e uma presilha com formato específico para conexão do equipo é ligado ao microcomputador para atuar sobre a mangueira do equipo (comprimindo ou distendendo). O sistema possui sinais de alarme audiovisuais para indicar falta de fluido, obstrução na veia, final de tempo de infusão, etc. Todo controle do sistema é feito por conjuntos de programas residentes, desenvolvidos em linguagem assembler.

BISTURI ÓPTICO PARA MANIPULAÇÃO DE PARTÍCULAS BIOLÓGICAS

CORREIA, A. L.; CESAR, C. L.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

No ano anterior apresentamos um sistema capaz de capturar e manipular partículas biológicas tais como espermatozoides, hemácias, bactérias, membranas citoplasmáticas de células vegetais e estruturas no interior dessas células, bem como esferinhas de latex. Tal sistema, chamado "pinça óptica", não causa danos aos organismos vivos, uma vez que o comprimento de onda do laser de Nd:YAG utilizado não é absorvido. Este ano mostraremos um sistema de "bisturi óptico" que utiliza um laser de nitrogênio altamente focado sobre uma amostra biológica. O comprimento de onda desse laser é fortemente absorvido por materiais orgânicos e deste modo produzimos um pequeno "furo" no tecido biológico. Utilizando-se este sistema em conjunto com a "pinça óptica" pode-se atravessar uma partícula por este mesmo furo, para dentro ou fora da amostra. Essa perspectiva é bastante interessante sobretudo à Engenharia Genética, onde um instrumento com essa precisão inexistia hoje e faz-se extremamente necessário.

PROJETO E DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA LASER INTELIGENTE PARA DIAGNÓSTICO E TRATAMENTO DE PLACAS CALCIFICADAS EM ARTÉRIAS

BARGO, P. R.; PACHECO, M. T. T.

UNIVAP - LOPE - São José dos Campos

A utilização de sistemas lasers em cirurgias tem avançado bastante nos últimos anos. Entretanto existe uma clara separação entre os sistemas de diagnósticos e aqueles para o tratamento. Neste trabalho descrevemos o projeto de um laser que está sendo desenvolvido no Laboratório de Laser e Opto-Eletrônica (LOPE) da UNIVAP, que inclui tanto a parte de análise tecidual como de atuação terapêutica em placas calcificadas em artérias. Neste projeto utiliza-se um laser de Nd:YAG, Q-Switched com uma taxa de repetição de até 30 pulsos por segundo. Utilizando-se a terceira harmônica (355 nm) da radiação fundamental (1.064 nm) consegue-se induzir fluorescência nos tecidos. Este processo que utiliza a relação de intensidades dos picos de emissão em 460/385 nm vem se tornando uma forte ferramenta ótica para diagnóstico de tecidos, devido a boa discriminação que estabelece, reduzindo praticamente a zero a margem de erro, assim como exige um software bem mais simplificado, do que aquele necessário para uma análise espectral mais extensa. A ablação do tecido calcificado é obtida com pulsos laser em torno de 480 nm, provenientes de um laser de corante bombeado pela terceira harmônica do laser de Nd:YAG. O sistema opera em pulsos intermitentes, um pulso processa o diagnóstico do tecido, que em caso de se tratar de uma calcificação emite um sinal elétrico que aciona uma célula acusto-ótica que compõe a cavidade do laser de corante, permitindo assim que o próximo pulso, ao bombear a célula de corante, possibilite a geração de um pulso de alta intensidade na região do azul pelo laser de corante. A ablação de tecidos utilizando-se pulsos extremamente curtos, permite que se tenha um campo elétrico relativamente intenso, interagindo com o tecido, enquanto se mantém em níveis bem baixos a quantidade de energia que é absorvida, evitando-se assim problemas de perfuração de artérias ou necrose.

ESPECTRÓGRAFO COM DETETOR DE PLANO FOCAL PARA A FAIXA ESPECTRAL DE 40 - 180 eV

FRAGUAS, G. B.; CASTRO, A. R. B. DE

LNLS e IFGW-UNICAMP

O LNLS projetou, construiu e caracterizou um espectrógrafo para a faixa espectral 40 - 180 eV utilizando uma grade toroidal de difração e um detetor de plano focal. O detetor consiste de um bloco de fibra ótica com uma face revestida de material fluorescente compatível com alto vácuo. Fótons de raios-X moles absorvidos por essa camada geram luz visível que viaja pelas fibras até um diodo array instalado no lado

de fora da câmara de vácuo. O sistema de acionamento computadorizado usa módulos digitais padronizados do LNLS tanto para posicionar o sistema detetor ao longo do plano focal da grade de difração, como para controle e leitura do diode array. A eletrônica analógica de read-out do diode array também foi projetada no LNLS. Esses módulos digitais são interfaciados a um microcomputador que executa programas (Pascal) de controle e display. A fenda de entrada, com 2.5 mm de altura e largura ajustável entre 0.1 e 0.5 mm, pode ser posta a distância inferior a 2 mm da fonte de luz (amostra), para otimizar o fluxo coletado. O instrumento foi acoplado a linha de luz TGM do LNLS instalada em CAMD (Baton Rouge, USA) (Vide resumo anexo) para caracterização com luz síncrotron monocromatizada. Estudaram-se a calibração absoluta de comprimento de onda, a eficiência de conversão do recobrimento fluorescente, a eficiência de difração da grade toroidal e a resposta espectral global do instrumento. Nesse equipamento está sendo montado um contador de fótons sensível a posição (2 dim), refrigerado a vapor de N_2 , que deverá permitir sua utilização em experimentos de fluorescência de raios-X moles em elementos leves (B, Be, Al, Si, etc).

UMA PROPOSTA PARA SE AUMENTAR A SENSIBILIDADE DE UMA CÉLULA DE GOLAY

URRUCHI, W. I.; PACHECO, M. T. T.
UNIVAP - LOPE - São José dos Campos

A célula de Golay^[1], pode ser vista como um detetor diferencial de gás térmico. Esta é a combinação de uma câmara pneumática com um sistema ótico de alta resolução ($1,4 \times 10^{-9}$ W). Dentro da câmara pneumática o gás é aquecido por transferência de energia de um filme que recebe algum tipo de radiação. Então a variação de temperatura dentro da câmara vai produzir oscilações numa membrana que está numa das paredes. Mediante um sistema ótico composto de lentes, grades e um fotodiodo é detetado a variação de curvatura da membrana espelhada com uma precisão de deslocamento de aproximadamente 1 Angstrom. Esta célula é utilizada como detetor nos espectrômetros de absorção. Apresenta-se neste trabalho um sistema ótico alternativo, de fácil alinhamento, e com precisão para se medir deslocamentos na membrana da ordem de até décimos de Angstroms. Este sistema está baseado no dispositivo ADIP^[2] (Angle Dependent Intensity Prism). Com este último pode-se medir variações angulares da ordem de 10^{-9} rad, considerando-se arranjos de pequenas distâncias quando comparados com outros dispositivos e com sistema ótico bastante simplificado. No presente caso um feixe de luz polarizada, é refletida na membrana incidindo sobre um prisma, onde o ângulo de reflexão interna é próximo do ângulo crítico. A potência do feixe emergente está diretamente relacionada com a

variação angular.

[1] M. J. E. Golay, Sci. Instr18(5), 357-62 (1947) [2] M. T. T. Pacheco, W. I. Urruchi, SPIE Vol.1646 Laser-Tissue Interaction III (1992)/411

Instrumentação II (INS) - 09/06/94

FD-BPM em guias de onda curvos: aplicação no modelamento de sensores a fibra ótica.

KALINOWSKI, H. J.

Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná —
80230-901 Curitiba, PR.

GUZMÁN, A. M.

Universidad Nacional de Colombia — Campus de
Medellin.

Em continuidade ao trabalho sendo realizado no modelamento numérico de sensores a fibra ótica, utilizamos um método de propagação de feixe por diferenças finitas (FD-BPM) para analisar guias de onda curvos imersos num meio cujo índice de refração depende de um parâmetro externo. A aplicação inicial deste processo é um sensor de temperatura já desenvolvido e espera-se que o método possa ser ainda aplicado a sensores imunológicos de campo evanescente, sensores para gases e para outros poluentes de natureza orgânica.

O guia de onda foi modelado como uma estrutura planar, cujas dimensões reproduzem aquelas de uma fibra ótica monomodo imersa no meio em questão. Os índices de refração são os do trabalho experimental. A equação de propagação nessa estrutura foi transformada para um sistema de coordenadas considerando o raio de curvatura imposto e resolvida, após a aplicação de um algoritmo de diferenças finitas, por um método de Runge Kutta. Como o guia de onda reproduz uma fibra monomodo, em cuja estrutura um perfil eletromagnético multimodal é lançado, no modelamento foi adotado um perfil gaussiano para lançar uma parcela considerável de energia na casca do guia monomodal. Este processo visa aumentar o acoplamento entre a luz sendo propagada e modos de casca que sofrem de forma mais acentuada perdas devido à curvatura da fibra, dependentes do índice de refração do meio externo.

Os resultados obtidos são capazes de reproduzir as características experimentais observadas com a variação de temperatura do meio externo. O mínimo da curva ocorre para o valor de índice de refração esperado e a dependência das perdas com o índice também reflete a situação experimental.

MONITORAMENTO E SIMULAÇÃO DO MOVIMENTO DE UM SOLUTO ORGÂNICO EM TRÊS SOLOS CARACTERÍSTICOS DO ESTADO DE SÃO PAULO.

GIULIANO, A. D.

Univ. de São Paulo. IFQSC. São Carlos

CRESTANA, S.; VAZ, C. M. P.

CNPDIA. EMBRAPA. São Carlos

LOMBARDI NETO, F.

SCS. IAC. Campinas

No XVI encontro, o modelo matemático LEACHM-P (Leaching Estimation and Chemistry Model - Pesticide), foi apresentado, como uma ferramenta, capaz de simular através dos seus dados de saída a percolação de solutos orgânicos pelo solo. Naquela oportunidade, utilizando-se vários valores de meia-vida para o herbicida atrazina, obteve-se diferentes curvas de concentração do pesticida em função da profundidade do solo. Neste trabalho, uso-se o valor de 80 dias para a meia-vida da atrazina, para os solos empregados neste trabalho. Desta maneira, utilizando-se este valor foi simulada a percolação da atrazina através de três solos característicos do Estado de São Paulo. Em uma fase posterior, pretende-se, comparar os valores obtidos nesta simulação, com os resultados a serem obtidos no experimento com lisímetros montado na Estação Experimental do I.A.C. em Campinas, SP. A comparação, tem como objetivos: a) validar o modelo para as condições brasileiras, mais especificamente para estes três solos do Estado de São Paulo, nesta primeira fase e; b) proporcionar à comunidade científica uma ferramenta de trabalho confiável, para o monitoramento de solutos orgânicos em solos brasileiros. Este trabalho faz parte da dissertação de mestrado de Antonio Donizetti Giuliano e conta com o apoio da FAPESP (projeto 90/3773-7), do CNPDIA-EMBRAPA e do I.A.C.

CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA ÓPTICO AUTOMATIZADO PARA SER UTILIZADO EM ESPECTROSCOPIA ÓPTICA

DUARTE, J. L.; JURAITIS, K. R.; DIAS, I. F. L.;

TOGINHO FILHO, D. DE O.; VALLADA, F. H. P.;

MOREIRA JÚNIOR, O.

Universidade Estadual de Londrina

Um dos objetivos principais do Laboratório de Óptica do Departamento de Física da UEL é estudar as propriedades ópticas de materiais semicondutores e heteroestruturas compostas de semicondutores, em especial as propriedades importantes para a aplicação na indústria optoeletrônica. Para o estudo dessas propriedades serão utilizadas as técnicas de fotoreflexância, fotoexcitação e fotoluminescência. Com esse objetivo construímos um sistema óptico básico, controlado por um microcomputador, que pode ser utilizado na montagem de sistemas destinados a medidas de transmissão

e absorção óptica, fotoreflexância, fotoluminescência e fotoexcitação. Nesse sistema, a luz de uma lâmpada de tungstênio-halogênio é focalizada de maneira a passar por um monocromador e então é focalizada sobre a amostra, após o que a luz transmitida, ou refletida, é focalizada sobre um fotodetector. O sinal elétrico do fotodetector é amplificado, convertido em analógico e então processado pelo microcomputador. A varredura do monocromador, em comprimento de onda, é feita através de um motor de passo que também é controlado pelo microcomputador. A configuração desse sistema, dependendo do tipo de aplicação, deve sofrer algumas alterações, inclusive a utilização de outros equipamentos tais como "lock-in", chopper e fotomultiplicadora.

DESENVOLVIMENTO DE UM LENSÔMETRO AUTOMÁTICO

ROTTA, R. T.; VENTURA, L.; CHIARADIA, C.;

CASTRO, J. C. DE

IFQSC - USP

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um equipamento capaz de medir o poder refrativo de lentes oftálmicas, tanto esféricas como cilíndricas, automaticamente num intervalo de +25di a -25di, pois nos equipamentos manuais utilizados por oftalmologistas, a precisão destas medidas são afetadas pelo efeito de acomodação ocular do observador.

Utiliza-se o Princípio de Badal, que consiste em um diafragma localizado em um dos focos de uma lente positiva padrão (LP) e um alvo difuso e móvel localizado no outro foco desta lente. Nesta disposição inicial, os raios de luz provenientes do alvo, emergem da LP paralelamente e incidem na lente-teste (LT), que está localizada próxima ao diafragma. Após os raios emergirem da LT, são captados por um telescópio. Move-se, então, o alvo de modo que a imagem observada seja a mais nítida.

No sistema em desenvolvimento, ao invés do telescópio, utiliza-se uma lente objetiva cujo foco está localizado sobre um detector de intensidade luminosa. Conectado ao detector, um motor-de-passos move o alvo até que a máxima intensidade de luz seja detectada. Assim, através da Equação Newtoniana para Lentes Delgadas, obtém-se o poder refrativo da LT.

Atualmente o intervalo de medida do sistema é de +18di a -20di com precisão de 0,2di para lentes esféricas. Um outro sistema, onde se utiliza quatro fontes de luz ("leds"), um detector de quadrante e um prisma, de modo que os feixes de luz incidam em três meridianos, está sendo desenvolvido. Esse sistema é capaz de medir lentes cilíndricas associadas a lentes esféricas (lentes oftálmicas) em dioptrias e eixo angular.

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA AQUISIÇÃO, PROCESSAMENTO E ANÁLISE DE SINAIS BIOMAGNÉTICOS

MURTA JR., L. O.; BAFFA, O.; MOREIRA, M.; PAULA, E.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto-USP

Nos experimentos em biomagnetismo geralmente sinais de baixa intensidade são adquiridos por um tempo longo. Isto exige uma cooperação do sujeito e impõe uma série de requisitos com relação ao protocolo de aquisição de sinais. É importante que o sinal seja visualizado durante toda a sua aquisição para garantir que não estão sendo registrados artefatos e seria desejável que uma pré análise do sinal fosse realizada antes de dispensar o voluntário. Um ambiente para aquisição, processamento, e análise de sinais biomagnéticos esta sendo desenvolvido. O programa deverá ter estrutura modular contendo um bloco para aquisição, outro para processamento englobando rotinas para filtros, médias e transformada de Fourier, e outro para visualização dos resultados. Além disso deverá permitir que outros módulos possam ser adicionados no futuro. Os sinais são adquiridos em uma placa A/D de 12 bits, 16 canais com timer, e visualizados em tempo real em um micro-computador PC, a seguir são armazenados na memória para posterior análise.

Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

SISTEMA AUTOMÁTICO PARA MEDIDAS MAGNETO-ÓPTICAS

BELO, L. C. M.; LEITÃO, U. A.

Dep. Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Descrevemos neste trabalho um sistema automático para medidas magneto-ópticas. Em sua configuração básica, o sistema permite medir birrefringência linear pelo método de Sénarimont, aliado a técnica de modulação elasto-óptica, com detecção via Lock-In, assim como medidas de rotação de Faraday, dicroísmo circular e linear. O sistema automático composto, basicamente, por uma interface (capaz de controlar dois motores simultaneamente) conectada a um controlador de motor de passos, que é responsável pela compensação das variações de sinal causadas por mudanças na estrutura cristalina da amostra com a temperatura e campos aplicados. A temperatura da amostra é mantida através de um controlador de temperatura acoplado a uma interface padrão GPIB. Um dispositivo acoplado ao criostato, dotado de *strain gage*, permite o controle e determinação da pressão uniaxial aplicada à amostra. Todo o sistema está conectado a um computador dotado de processador 80386, no qual um programa mestre controla os equipamentos conectados e faz a aquisição de dados, agilizando significativamente o processo experimental.

LIMNÓGRAFO MICROCONTROLADO PARA USO EM SISTEMAS AGRÍCOLAS.

RABELLO, L. M.; CRUVINEL, P. E.

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária-CNPDA DENARDIN, J. E.

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária-CNPCT

Limnógrafos tradicionais são instrumentos constituídos por dois sistemas operacionais, quais sejam, uma bóia e um tambor movido a relógio de corda. Os equipamentos comerciais disponíveis são equipados com formulários para giro completo em uma hora, em 24 horas ou em sete dias. Entretanto, os limnógrafos que operam em sete dias não apresentam um adequado poder de resolução gráfica e se regulados para 24 horas, torna-se impraticável a operacionalização, em virtude das dificuldades para o acesso diário até o local de instalação do instrumento. Uma possível solução desses problemas é a utilização de rolos de papel milimetrado com capacidade de um mês, usando o relógio acelerado como em operação para sete dias. Todavia, essa solução acarreta um consumo extremamente elevado de papel milimetrado, em geral de alto custo. Neste trabalho é apresentado uma nova concepção em projetos de limnógrafos, onde um circuito microcontrolado foi utilizado para proporcionar a automação do processo de medida e possibilitou a eliminação do uso do tambor e do papel milimetrado, bem como o registro contínuo dos dados em formato digital, eliminando, assim, os problemas de resolução gráfica e a visitação contínua ao local de medida. A arquitetura desenvolvida possibilita a armazenagem de dados por um período de até 45 dias, com intervalo de amostragem de 1 minuto. Resultados mostraram a versatilidade do equipamento, bem como a possibilidade de emissão de relatórios gráficos mostrou-se de grande utilidade. Utilizou-se no desenvolvimento um microcontrolador 80C31 e memória RAM de 64 Kbytes, bem como para operação de campo utilizou-se uma bateria de 12 Vdc para operação em campo.

Instrumentação para a medida de micro-variações de órgãos vegetais com o uso de um sensor baseado em fibra óptica.

FERREIRA, W. S.; CRUVINEL, P. E.

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA-CNPDA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA, CAMPUS DE SÃO CARLOS.

Neste trabalho é apresentado o projeto e construção de um sistema de medida com capacidade de monitorar continuamente micro-variações nas dimensões de órgãos vegetais. As medidas de micro-variações dos órgãos vegetais estão diretamente correlacionadas com o potencial hídrico da planta. Além da adequação de um sistema de medida clássico com um sensor de deslocamento tipo LVDT e do projeto de um sistema

coletor de dados baseado no microcontrolador 80C31, tanto a nível de hardware, baseado em módulos básicos dos fabricantes, como todo o software para a completa operação, um novo sensor é apresentado, o qual foi desenvolvido utilizando-se fibras ópticas, laser semiconductor operando em 1.3 μm e arquitetura baseada em um interferômetro de Mach-Zehnder. O software do sistema coletor foi desenvolvido em linguagem C e compilado para o conjunto de instruções do microcontrolador 80C31. Resultados mostraram uma correlação adequada entre as medidas de micro-variações de órgãos vegetais com o transdutor baseado em fibra óptica e as medidas realizadas com a metodologia clássica, utilizando-se um sensor de deslocamento tipo LVDT.

Desenvolvimento de um Software de Controle e Análise de um Sistema de Z-Scan para Determinação do Índice de Refração Não-Linear de Materiais de Interesse para Lasers

SAMAD, R. E.; VIEIRA JUNIOR, N. D.
IPEN

Com o objetivo de implementar em nosso laboratório um sistema de Z-Scan para medida do índice de refração não-linear de materiais de interesse para lasers, foi desenvolvido um software de controle de equipamentos, tomada e análise de dados em linguagem de programação PASCAL, ambiente TURBO PASCAL 7.0. Este Software é basicamente composto por um núcleo onde encontram-se os dados e os menus, e dois grandes módulos: um deles é o módulo de controle de equipamentos, que controla um Lock-In e um translador micrométrico acionado por motor de passo, e o outro é um módulo de tratamento e análise de dados, onde são efetuados os cálculos que fornecem o índice de refração não-linear. Além destes módulos, foram desenvolvidas rotinas que permitem que se exporte os dados para impressora, ou os gráficos para plotter ou outros programas. Grande parte do software foi desenvolvida em programação orientada para procedimentos, tendo sido também utilizada programação orientada para objeto em várias rotinas. Atualmente o sistema encontra-se em fase de otimização da óptica, sendo este software de fundamental importância na realização de varreduras para alinhamento do sistema, e verificação do sinal, e razão sinal/ruído do sistema.

UM MÉTODO SIMPLES PARA A MEDIDA DA DURAÇÃO DE EVENTOS MECÂNICOS COM LASER

TEIXEIRA, F. L.; MENDONÇA, A. P.; YOSHIOKA, C. R. T.
IPD/CTEx

Neste trabalho a proposta de medição da duração de eventos mecânicos lentos ou rápidos apresentada em [1] é aperfeiçoada visando superar as dificuldades ali encontradas. Intervalos, desde μs até algumas horas podem ser medidos com razoável precisão. Como vantagens deste novo método frente ao anterior podemos citar: a utilização de apenas um sensor que registra o início e o término do evento, ao invés de dois; a inexistência do transdutor eletromecânico e consequentemente do supressor de falsos contatos ("contact bounces"), aumentando a precisão da medida; a redução da interferência eletromagnética pela supressão do solenóide atuador do sensor eletromecânico; a possibilidade de utilização de contadores mais simples de apenas uma entrada; e, finalmente, a eliminação dos retardos na demodulação causados pela descarga dos capacitores. A idéia básica do método consiste no aproveitamento da comutação do feixe laser por um modulador mecânico que anteriormente visava apenas facilitar o processamento eletrônico do sinal para estabelecer uma base de tempo ótica de alta precisão. O sensor utilizado consiste de um fotodetector comercial de Si iluminado por um laser de HeNe de baixa potência (5mW).

[1]D.M. Sales et al., "Medindo a duração de Eventos com Laser", XV ENFMC Caxambú, MG, 05-09 Maio 1992.

ESTUDO E DESENVOLVIMENTO DE UM PROTÓTIPO DE LASER DE Ho:YLF

ZEZELL, D. M.; ROSSI, W. DE; NOGUEIRA, G. E. C.; BERRETA, J. R.; RANIERI, I. M.; COSTA, F. E. DA; VIEIRA JÚNIOR, N. D.; MORATO, S. P.
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares- CNEN/SP

A crescente aplicação dos lasers de Hólmio emitindo na região de comprimento de onda $\lambda = 2 \mu\text{m}$ em telemetria, em sistemas LIDAR e na Medicina entre outros motivaram o estudo e desenvolvimento de um protótipo deste laser no IPEN. A emissão em $\lambda = 2 \mu\text{m}$ é fortemente absorvida pela água e é eye safe. Os cristais de Er:Tm:Ho:YLiF₄ que estão sendo crescidos e testados atualmente visam a construção de um protótipo de laser pulsado para aplicações biomédicas. Neste sentido um levantamento extensivo destas aplicações foi realizado e este protótipo será testado em colaboração com a classe médica em odontologia (na remoção de cáries superficiais e no preparo cavitário), em ortopedia (para a ablação de cartilagens, tratamento de hérnia de disco, joelho e ombros), em oftalmologia (no tratamento de glaucoma) e em cardiologia (na desobstrução de artérias). Utilizamos uma fonte com energia de bombeio de até 360 J, cavidade refletora revestida de prata, em dupla elipse com lâmpadas de xenônio nos focos e bastão no foco comum, todo o sistema refrigerado à água. Obtivemos emissão do laser de Ho:YLF em $\lambda = 2 \mu\text{m}$, com duração de pulso 300 μs (FWHM), energia de até 1,5J e eficiência de slope de 0,79%.

Trabalho parcialmente financiado pela SCTDE/SP, RHAe e FENEP/PADCT

TOMOGRAFIA SIMULTÂNEA DE DUPLA ENERGIA PARA CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DE UM MEIO POROSO DEFORMÁVEL SOB DIFERENTES GRAUS DE HIDRATAÇÃO.

CÁSSARO, F. A. M.

Univ. de São Paulo, IFQSC, São Carlos

CRESTANA, S.

CNPDIA-EMBRAPA, São Carlos

Os materiais porosos, em geral, apresentam modificações em sua estrutura física quando submetidos a diferentes graus de hidratação podendo redundar em variações de sua forma, volume, densidade dentre outros parâmetros físicos de interesse. Solos argilosos expansivos como os de varzeas são exemplos reais da ocorrência deste fenômeno. A caracterização do comportamento físico destes solos se faz necessária, o que não se consegue de modo adequado através das técnicas até agora conhecidas e empregadas. Através da utilização de filtros de material específico a radiação de Bremsstrahlung proveniente de uma fonte de Raios X foi modificada de modo a se ter, simultaneamente, no feixe transmitido pelo filtro a presença de dois picos de radiação com energias distintas. Com a utilização da técnica de reconstrução tomográfica pode-se conhecer a distribuição dos coeficientes de atenuação linear dentro de um plano da amostra. Sabendo-se que o coeficiente de atenuação linear, a densidade e a umidade da amostra de solo obedecem a relação dada por:

$$\mu_i = \mu_{msli} \rho_{sl} + \mu_{magi} \theta(1)$$

onde μ_{msli} e μ_{magi} são respectivamente os coeficientes de atenuação em massa para o solo e para a água na energia E_i ; Para cada uma das energias utilizadas determinou-se o valor de (1) obtendo-se assim um par de equações que possibilitam encontrar os valores de ρ_{sl} e θ , respectivamente a densidade e a umidade da seção tomográfica da amostra, objetivo-fim deste trabalho. A partir deste resultado foi possível observar o comportamento físico do solo estudado em função do seu grau de hidratação. Agradecimentos: CNPq, FAPESP (Proc.90/3773-7), CNPDIA-EMBRAPA, DFCM-USP.

SISTEMA DE AUTO-ALINHAMENTO

SILVEIRA JUNIOR, J. B.; SANTOS, S. E. DOS;

ZÂNGARO, R. A.

UNIVAP - LOPE - São José dos Campos

O sistema de auto-alinhamento aqui proposto permite o alinhamento entre um feixe laser e um conjunto constituído por quatro fotodetetores, dispostos em forma de cruz (alinhamento espacial, nos eixos horizontal e vertical). Assim, cada par de fotodetetores é responsável

pelo alinhamento em um eixo, sendo portanto, o sistema espacial de dois eixos constituído por dois módulos de alinhamento linear. Cada módulo, responsável por um eixo, é controlado por um sistema móvel, o qual identifica o ponto de equilíbrio luminoso entre os dois fotodetetores, movendo-se o conjunto sensor até encontrar este ponto. Define-se no projeto, ponto de equilíbrio luminoso como sendo o ponto referencial que o sistema identifica quando os dois fotosensores estiverem iluminados equitativamente. O conjunto fotosensor é acoplado a um sistema de deslocamento micrométrico motorizado, o qual possibilita a movimentação da parte sensora dentro de uma faixa de precisão que depende basicamente da aplicação desejada. Para pequenos ranges o sistema permite alinhamento nos dois eixos com uma precisão máxima de 20 μm .

MEDIDOR DE ESPESSURA UTILIZANDO CCD

SPINA, F. D.; LIMA, C. J. DE; ZÂNGARO, R. A.

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba - Laboratório de Opto-Eletrônica - São José dos Campos - SP

Este projeto envolve o desenvolvimento de um sistema ótico-mecânico para determinação da espessura de placas planas de material opaco ou transparente. Um feixe laser de He-Ne é dirigido para um CCD. Utilizamos uma ótica a fim de aumentar as dimensões do feixe, fazendo com que o mesmo atingisse toda a área do CCD. O feixe é interceptado parcialmente por uma haste em contato direto com a superfície a ser medida, provocando um ponto de escuro numa determinada região do CCD. As variações na espessura da placa a ser medida provocam deslocamento da região com ausência de luz. Utilizando um circuito eletrônico as variações da espessura são convertidas em sinal analógico de tensão. O sistema utilizando CCD, tem como principal vantagem a substituição de uma parte do sensor mecânico dos sistemas convencionais por um sensor eletrônico. Além disso, apresenta respostas rápidas com precisão de 25 μm para um range máximo de 25,4mm. Sua principal aplicação é a medição da espessura de placas planas fabricadas em larga escala, onde o controle de qualidade e as perdas de material são fatores de extrema importância.

APLICAÇÃO DE LASER EM CORTE DE POLÍMEROS

AMORIM, C. F.; PERETA, M. A.; FURUZAWA, S. K.;

ZÂNGARO, R. A.

UNIVAP - LOPE - São José dos Campos

Este projeto tem por objetivo melhorar o corte de materiais poliméricos, utilizando o laser de CO_2 que apresenta alta absorção para uma vasta gama destes materiais. Podemos citar como exemplo, a substituição

do conjunto cortante (faca/contra-faca), reduzindo o tempo de produção, produzindo formas mais precisas e de qualidade, obtendo ainda maior aproveitamento do material. Com o controle centralizado por sistema computadorizado, a potência laser é controlada em função dos parâmetros do material e da velocidade de corte. A análise teórica determina uma variação linear na potência do laser em função da velocidade de corte, portanto quanto maior a velocidade de corte, maior a potência exigida do laser. Na análise experimental foram utilizados os seguintes materiais: polietileno, poliéster e a celulose. Verificou-se que a potência de 12 Watts (máxima potência disponível da fonte laser utilizada) é insuficiente para obter um corte bem definido (de boa qualidade), sendo que a análise teórica prevê uma potência maior que 12 Watts para a velocidade mínima de corte. Para a celulose houve uma variação de 8,3% entre os valores obtidos e os dados tabelados feitos por laboratórios especializados.

Instrumentos e Técnicas (INS) - 10/06/94

MEDIDA DE POSIÇÃO EM UMA DIMENSÃO COM MULTIPLICADORES DE ELÉTRONS DO TIPO MCP, UTILIZANDO TÉCNICA DE LEITURA POR LINHA DE ATRASO

CAVALCANTE, I. P.; MACCHIONE, E. L. A.; KOIDE, K.; HIRATA, J. H.; VASCONCELOS, S. S.; LANZA, A. C.; SOLER, M. A. F.; ZANDONÁ, F. P.; DIETZSCH, O.

Instituto de Física - USP

Detecutores multiplicadores de elétrons do tipo "micro-channel plate" (MCP) são utilizados em diversas áreas, com uma grande eficiência na detecção de elétrons, íons lentos (energias de alguns KeV), luz ultra-violeta e raios-X. MCP's apresentam alto ganho (10^3 a 10^4 elétrons por elétron secundário), são detectores de sinal muito rápido (tempo de subida do pulso da ordem de 300 ps) e suportam altas taxas de contagem, possibilitando medidas de tempo com alta resolução. Para medida de posição em uma dimensão com MCP, utilizando técnica de leitura de posição por linha de atraso, foi construído um anodo de pistas metálicas, paralelas e regularmente espaçadas entre si (e perpendiculares ao eixo da coordenada que se deseja medir), ligadas a intervalos regulares de uma linha de atraso. A carga proveniente do MCP é depositada nas pistas, formando pulsos que se propagam pela linha, em sentidos opostos. A diferença de tempo entre as chegadas desses pulsos às extremidades da linha é proporcional à

posição de impacto da partícula no MCP. Testes com partículas α incidindo sobre uma máscara de 6 fendas de 0.4 mm de largura (espaçamento entre as fendas de 3 mm) à entrada do detector mostraram boa linearidade, na porção central do espectro de posição, com resolução total média de 0.5 mm.

SISTEMA PARA MEDIÇÃO DE EVENTOS DA ARMA ANTI-CARRO PARA PEQUENOS ESCALÕES.

MENDONÇA, A. P.; CARVALHO, B. C. DE; FERREIRA, M. M. DA V.

IPD/CTEx

HENRIQUES, E. M.

UNIMEP

Este trabalho foi desenvolvido pelo CTSELT/IPD e faz parte de um contexto maior, no qual se realizou o teste do propelente para a arma anti-carro para pequenos escalões. A instrumentação utilizada é composta de um dispositivo microprocessado, uma placa de conversão analógico-digital e um osciloscópio digital. Os três equipamentos comunicam-se entre si via padrão RS-232. O objetivo do ensaio foi medir os tempos entre a ocorrência de quatro eventos durante o tiro: o disparo, saída dos gases pela retaguarda, saída da granada pela boca do tubo e passagem da granada por um sensor a 10 cm do tubo. O sistema de medidas foi elaborado de forma que sejam gerados quatro pulsos elétricos, um para cada evento, a partir da quebra de pequenas barras de grafite, utilizadas como elementos sensores de posição. Na apresentação do trabalho, pretender-se-á abordar o "hardware", o protocolo da comunicação entre os dispositivos e os resultados do primeiro ensaio, realizado em 17/07/93.

SISTEMA DE CONTAGEM DE FÓTONS SENSÍVEL À POSIÇÃO EM 2 DIM

FRAGUAS, G. B.; CASTRO, A. R. B. DE

LNLS e IFGW-UNICAMP

VERDUGO, J. E.; SOUZA, L. G. DE

LNLS

Projetou-se, construiu-se e testou-se um sistema de contagem de ftons sensível à posição em 2 dimensões. O sistema consiste de um detetor comercial, da eletrônica de decodificação de posição e contagem, do hardware/software de interface com um microcomputador e de uma câmara refrigerada a vapor de N_2 . O detetor é constituído por foto-catodo de 25 mm diâmetro útil, estruturas multiplicadoras de elétrons tipo micro channel plate e um ânodo resistivo. A eletrônica inclui amplificadores rápidos de carga, circuitos de retenção do valor de pico dos pulsos de carga, divisores analógicos e conversores A/D. A interface foi construída sobre uma placa base comercial padronizada para microcomputador da linha PC e gera interrupções a cada evento, a

razões de até 5 kHz (em um micro 286/20MHz). O software de display gráfico mostra em cores falsas um mapa XY de 256x256 pixels com a contagem acumulada. A contagem total no escuro é 130 Hz a temperatura ambiente e menor que 5 Hz sob refrigeração. A eficiência global (fotons contados)/(fluxo incidente) é 0.05, devendo-se observar que a eficiência quântica do foto-catodo é 0.12. Foram feitas estimativas exaustivas de ganho dos MCP's e da resolução espacial. O valor medido para esta última (cerca de 0.3 mm) é compatível com os limites ditados por ruído Johnson no ânodo resistivo e pelo ganho nas estruturas multiplicadoras de elétrons. Quanto ao desempenho prático, ele é comparável aos resultados de outra montagem para espalhamento Raman, onde o detector era um diode-array com intensificador de imagem. O contador de fotons 2-dim, entretanto, tem uma área útil muitas vezes maior. O detector está sendo instalado no espectrógrafo de raios-X moles construído no LNLS (vide resumo anexo).

**ESTUDO DE UMA CÂMARA
MAGNETICAMENTE BLINDADA EM
ESCALA REDUZIDA CONSTRUÍDA COM
MATERIAL FERROMAGNÉTICO DE
BAIXO CUSTO**

RODRIGUES, M. G. RODRIGUES; ZIMMERMAN, R. L.; BAFFA, O.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto-USP

Devido a alta sensibilidade das medidas de campo magnético realizadas em biomagnetismo, técnicas para supressão da interferência do ruído magnético ambiental, que é varias ordens de grandeza maior que os sinais de interesse, têm que ser desenvolvidas. Gradiômetros combinados com câmaras blindadas tem sido o arranjo mais apropriado para se atingir o limiar de sensibilidade dos detectores. Estas câmaras são geralmente construídas com materiais ferromagnéticos de alta permeabilidade magnética, como μ metal, e alumínio de alta condutividade elétrica. Nesta configuração, o material de alta condutividade responde pela blindagem em altas frequências e o material de alta permeabilidade pela blindagem em baixas frequências e do campo estático. Neste trabalho investiga-se a possibilidade de utilizar a liga ferro silício submetida a um campo magnético (*shaking*) para blindagens de campos magnéticos de baixa frequência. O campo remanente, coercitivo e a permeabilidade magnética em função do campo aplicado caracterizam o material. Os resultados experimentais mostram que o campo *shaking* melhora a performance da blindagem por um fator de até 5. Uma análise teórica está sendo feita para determinar-se a permeabilidade efetiva com o campo *shaking* aplicado.

Agradecemos ao prof. J.E. Zimmerman a proposição deste trabalho e pelas discussões em sua fase inicial e a ACESITA

pelo fornecimento de amostras de FeSi
Apoio financeiro CNPq, FAPESP, CAPES e TWAS

**DESENVOLVIMENTOS EM
INSTRUMENTAÇÃO PARA DETECÇÃO
DE RAIOS-X**

BARBOSA, A. F.

CBPF/CNPq

GUEDES, G.

LNLS/CNPq

Apresentamos dois detectores de raio-X e seus respectivos sistemas de tratamento de sinais e aquisição de dados. O primeiro deles é um detector a gás sensível à posição de incidência dos fótons, propiciando portanto a obtenção de espectros de espalhamento de raios-X em tempo real. O segundo utiliza um dispositivo semicondutor de baixo custo (diodo P.I.N.) para absorção e contagem dos fótons. O detector a gás utiliza uma linha de retardo que atrasa os pulsos elétricos originados pela ionização de moléculas do gás, de modo a permitir a medida da posição de incidência dos fótons a partir do tempo de propagação dos pulsos através da linha. No detector a semicondutor os fótons são absorvidos na região intrínseca (I) do diodo P.I.N., onde geram pares elétron-buraco que são captados respectivamente nos eletrodos P e N. Os dois detectores terão aplicações nas linhas de feixe do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

**MÉTODOS DE RECUPERAÇÃO DE
DETECTORES SILÍCIO E GERMÂNIO**

RIZZO, P.; SANTOS, W. M. S.

U.F.R.J.

Detectores semicondutores são usados extensivamente no Brasil por vários grupos de pesquisa que necessitam analisar radiações X e γ emitidas pelo material em estudo. A falta de infra-estrutura existente no Brasil para oferecer assistência técnica aos mesmos e as dificuldades inerentes ao envio de tais detectores ao exterior para reparo, mostram a grande importância do desenvolvimento desta atividade para o país. As causas mais comuns de danos em detectores semicondutores têm sido a falta de condições herméticas dos criostatos e danos nas janelas de berílio provocando aumento da pressão no interior dos criostatos e como consequência, a adsorção de impurezas nas superfícies dos cristais. Outro problema se refere a danos em "FETs" no interior dos criostatos. Os processos de recuperação baseiam-se na substituição da janela ou do "FET" que apresentam danos. Em seguida o vácuo é refeito dentro do criostato e os cristais são aquecidos acima da temperatura ambiente visando a retirada das contaminações superficiais. Neste trabalho são apresentados os sintomas iniciais, os procedimentos e os resultados finais obtidos na recuperação de quatro detectores, um tipo Ge(Li)

do IEN-RJ, um tipo Ge(HP) da U.F.F., um tipo Si(Li) do CENA-USP-Piracicaba e um tipo Ge(HP) do I.F.-U.F.R.J.

APLICAÇÃO DE TRANSFORMAÇÕES ELÍPTICAS PARA FILTRAGEM DE FUNDO DE IMAGENS COLORIDAS.

BONVENTI JR, W.; ISOTANI, S.; ALBUQUERQUE, A. R. P. L.

Divisão de Sistemas Modeláveis - L.S.I. - Escola Politécnica da USP.

A análise de imagens microscópicas fornece a quantificação necessária aos diagnósticos em citopatologia e histopatologia. Nesta área, os atributos de cor se prestam para simplificar a filtragem dos dados de fundo, em estágios iniciais do processamento. Assim, a filtragem se torna facilitada. Porém, devido ao processamento massivo exigido pelos métodos padrões, esta implementação se torna extremamente útil. Propõe-se um método de filtragem dos dados de fundo da imagem, usando coordenadas elípticas no Diagrama de Cromaticidades do C.I.E. (Comission Internationale de l'Éclairage) de 1931, auxiliados pela região correspondente à cor branca do mesmo. O método compõe-se de três passos. Primeiramente, são calculadas as coordenadas CIE dos dados da imagem. Segundo, os dados são calculados em coordenadas elípticas, baseados na posição da cor branca no Diagrama. Terceiro, o uso de um algoritmo de busca binária faz a filtragem. Como resultado, este processo se torna minimizado. Pode-se compará-lo com outros métodos que usem técnicas de "color clustering".

CÂMARAS DE IONIZAÇÃO COM AR COMPRIMIDO.

RODRIGUES, R. G. DE S.; PELÁ, C. A.; NETTO, T. G.

FFCLRP

O aumento da sensibilidade em câmaras de ionização é associado tradicionalmente com o aumento no volume da câmara. Câmaras de grande porte são convenientes para calibração de câmaras menores nos centros de dosimetria, porém, seu uso portátil é impraticável. Dentro desse contexto, as câmaras de ionização com ar comprimido são de grande interesse, pois apresentam grande sensibilidade e portabilidade, ideais para uso em hospitais e para medidas ambientais. O ar foi utilizado devido a seu número atômico efetivo ser próximo do número atômico efetivo de materiais orgânicos. Quando a pressão no interior da câmara é incrementada, a secção de choque do ar também aumenta, mas esse efeito concorre com a diminuição do livre percurso médio dos íons formados no corpo do gás. Por um lado, mais íons são formados, por outro lado, a mobilidade desses íons diminui, fazendo com que o

efeito de recombinação seja maior. Os resultados experimentais indicam que o aumento na secção de choque é o efeito predominante, pois a corrente de ionização aumenta com a pressão. Medidas feitas com uma fonte de Césio, mantendo a distância constante, deram para uma pressão de 40 Kgf/cm², uma corrente de ionização de 111.4 pA, sendo que essa corrente cai para 4.8 pA, quando a pressão é diminuída para 1 Kgf/cm². Esses números mostram um ganho efetivo de 23 vezes para as pressões citadas. As curvas obtidas foram modeladas através de funções polinomiais quadráticas, e apresentaram coeficientes não lineares muito pequenos indicando que o efeito de recombinação foi praticamente desprezível.

Instrumentação à Fibra Óptica (INS, OTI) - 10/06/94

SISTEMA AUTOMATIZADO DE CARACTERIZAÇÃO DE AMPLIFICADORES A FIBRA ÓPTICA

MAZZALI, C.; FRAGNITO, H. L.

UNICAMP - IFGW

Os amplificadores a fibra óptica dopada com terras raras, particularmente o Amplificador a Fibra Dopada com Érbio (AFDE), vêm conquistando um grande mercado nos sistemas de comunicações ópticas, principalmente nos sistemas de altas taxas, longas distâncias e redes de TV a cabo. O AFDE oferece vantagens significativas sobre os regeneradores de sinais opto-eletrônicos tradicionais tais como grande largura de banda, imunidade a ruído de indução e baixo erro de temporização. Neste trabalho apresentamos um sistema flexível de caracterização de amplificadores ópticos que funciona de forma totalmente automatizada, podendo atuar sobre todos os parâmetros operacionais do dispositivo, bem como monitorar as grandezas relevantes do amplificador. O sistema consiste de um analisador de espectro óptico (AEO) e um multiprogramador (MPG) controlados via GPIB por um microcomputador operando em interface gráfica (ambiente MS-Windows). O computador controla, através do MPG, as correntes e temperaturas dos lasers de sinal e de bombeio, e monitora os espectros destes dois lasers através do AEO. Dentre as possibilidades do sistema, destacamos o levantamento da curva de ganho em função da potência de bombeio, curva de saturação do ganho, distribuição espectral dos lasers de sinal e de bombeio, monitoramento e controle da temperatura do laser de bombeio durante todo o processo de medição, determinação da largura de linha do laser de bombeio e integração espectral da potência óptica gerada por emissão espontânea.

Desenvolvimento de Termômetro Utilizando Fibra Ótica de Alta Birrefringência

VALENTE, L. C. G.

CEPEL

SILVA, L. M.; WERNECK, M. M.

Programa de Engenharia Biomédica - COPPE - UFRJ

Um termômetro utilizando fibra ótica de alta birrefringência (HB) como ponta sensora está sendo desenvolvido para aplicações médicas. O objetivo é que ele responda na faixa de 35°C a 45°C com uma resolução de 0,1°C. A tecnologia pode, entretanto, ser adaptada para emprego em outras faixas e resoluções. Nas fibras HB existem dois modos de propagação com polarizações ortogonais (HE_{11}^x e HE_{11}^y), orientados segundo os eixos principais da fibra (x e y). Quanto maior a anisotropia da seção reta da fibra, maior a diferença entre as constantes de propagação β_x e β_y para os dois modos ortogonais. A birrefringência modal B é dada por: $B = (\beta_x - \beta_y) \lambda / 2\pi$, onde λ é o comprimento de onda da luz na fibra. Para o tipo de fibra HB utilizada, a birrefringência modal B varia com a temperatura a uma taxa de aproximadamente $-4 \times 10^{-7} / 4^\circ\text{C}$. Assim, considerando um certo comprimento de fibra HB ao se incidir luz linearmente polarizada, a defasagem entre as polarizações x e y no início da fibra será zero (0) e ao final será δ , onde δ varia linearmente com a temperatura. Isto possibilita que seu monitoramento forneça uma informação direta da temperatura a que está sujeita a fibra HB. Uma montagem de laboratório foi realizada para verificar o princípio de funcionamento ótica. As experiências utilizaram trechos de fibra de 7,2 cm, 6 cm, 3 cm e curvas de potência ótica versus temperatura foram obtidas, com resultados satisfatórios. Atualmente está em fase de teste um protótipo utilizando LED, acoplador epolarizador a fibra ótica e trecho de fibra HB com extremidade espelhada. O comprimento da região sensora é de cerca de 1,0 cm, que deverá ser adequado à faixa desejada.

SENSOR A FIBRA ÓTICA PARA MEDIDA DE DEFORMAÇÕES ESTRUTURAIS

SILVEIRA JUNIOR, L.; SILVA, R. B. DA; ZÂNGARO, R. A.

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba - Laboratório de Opto-Eletrônica - São José dos Campos - SP

Neste trabalho apresentamos um sensor ótico para determinar a flexa apresentada por estruturas de concreto armado, quando submetidas a carregamentos. O sensor ótico é constituído por uma fibra ótica monomodo de baixa birrefringência, protegida por uma cobertura à base de resina poliéster e fibra de vidro, que lhe garante elevada resistência mecânica, podendo então ser embebida no concreto, sem danos à fibra ótica. O funcionamento deste sensor é baseado no efeito fotoelástico, onde o stress causado pela deformação da estrutura produz uma birrefringência na fibra ótica induzindo uma

rotação no ângulo de polarização da luz polarizada guiada pela fibra. O efeito fotoelástico aparece devido a flexa provocada por uma carga controlada, aplicada no corpo de prova. Na montagem experimental foi utilizado um laser polarizado como emissor, um polaróide como analisador e um fotodiodo como detetor. Os testes foram realizados em máquina de ensaios de flexão. Nos resultados obtidos pode-se verificar uma repetibilidade nas curvas de resposta das medidas, mostrando a viabilidade experimental do dispositivo.

INTERFERÔMETRO DE MICHELSON BIESTÁVEL

MONTEIRO, E. C.; ADABO, G. J.; RODRIGUES, P. J. C.; OLIVEIRA, J. E. B.

CTA - ITA - IEEC

Existem várias configurações de dispositivos biestáveis ópticos, entre elas destacam-se na literatura o interferômetro de Fabry-Perot biestável e o modulador eletro-óptico de amplitude biestável. Neste trabalho apresenta-se uma proposta teórica e resultados experimentais de uma nova configuração utilizando um interferômetro de Michelson com realimentação de tensão no modulador eletro-óptico de LiNbO_3 proporcional à intensidade de luz na saída do interferômetro. Esta nova configuração permite realizar uma análise experimental com relativa facilidade, em face da simplicidade do alinhamento do interferômetro de Michelson, comparativamente aos demais tipos de interferômetros. Adicionalmente, o interferômetro de Michelson biestável tem a mesma função de transferência do interferômetro de Mach-Zehnder biestável. Este último é muito apropriado para aplicações em óptica integrada. Desta forma, ao estudar-se o interferômetro de Michelson biestável em óptica volumétrica, obtêm-se conhecimentos indispensáveis para projetar dispositivos biestáveis em óptica integrada, os quais têm grandes potencialidades em computação óptica. O modulador eletro-óptico utilizado neste trabalho é de LiNbO_3 devido às ótimas propriedades eletro-ópticas deste material e também ao fato dele já ser crescido com boa qualidade no Brasil (IFQSC-USP).

DESENVOLVIMENTO DE UM LASER À FIBRA DOPADA COM ÉRBITO SINTONIZÁVEL E MONOMODO NA CONFIGURAÇÃO EM ANEL

GIRALDI, M. T. M. R.

DMO/FEE/UNICAMP

CELASCHI, S.

CPqD/TELEBRÁS

Foi montado um laser à fibra dopada com Er^{+3} na configuração em anel. Este dispositivo consiste de 18 m de

fibra dopada (ErAl/SiO₂), um acoplador WDM (Wavelength Division Multiplex), um filtro passa-banda sintonizável, um controlador de polarização e o laser semicondutor de bombeio, que emite em 1480 nm. O comprimento de onda pode ser continuamente sintonizado através da rotação de um posicionador multivolta no filtro passa-banda ($\Delta\lambda = 1,35 \pm 0,05$ nm) sintonizável. Sua faixa de sintonia é de 32 nm em torno de 1545 nm. O laser de bombeio fornece uma potência óptica máxima acoplada à fibra óptica em "pigtail" de $P_B = 21$ mW. Está montado em DIP-14 (CPqD - TELEBRÁS) com controle de temperatura. Todas as emendas foram feitas por fusão. Foram realizadas medidas que mostraram que o laser em anel emite em torno de 1545 nm numa faixa de sintonia de 32 nm, é monomodo (com supressão lateral > 30 dB) e bastante estável temporal e espectralmente. Sua largura de linha estimada situa-se na faixa de kHz. Emite potência óptica P_S da ordem de mW e possui uma eficiência P_S/P_B de 16%. As perdas na cavidade são estimadas em 8 dB. Está sendo feito, atualmente, um modelamento teórico para se estimar a potência óptica de saída, eficiência e potência de limiar do laser em anel e comparar com os resultados obtidos experimentalmente. Este modelamento é parametrizado pelo ganho, potências de saturação de sinal e bombeio na fibra, seu comprimento e perdas na cavidade.

SENSORES A FIBRA ÓPTICA PARA LINHAS DE TRANSMISSÃO DE ALTA TENSÃO

WERNECK, M. M.

Universidade Federal do Rio de Janeiro/COPPE

PORCIÚNCULA, P.

Companhia de Eletricidade do Rio de Janeiro (CERJ)

Para o monitoramento temporário de corrente e tensão em linhas de transmissão de alta tensão, tanto em áreas

urbanas como rurais, a instalação de transformadores de corrente (TC) e de tensão (TP) é algumas vezes impraticável. Por outro lado, células de Pockels e Faraday a fibra óptica para tensão e corrente, apesar de soluções para o primeiro mundo, não são apropriadas para países em desenvolvimento por várias razões. Este trabalho descreve a construção sensores híbridos a fibra óptica para tensão e corrente para linhas de alta tensão que são um meio termo entre a confiável e convencional tecnologia elétrica e a cara tecnologia óptica de última geração. É o seguinte o funcionamento do sistema: A parte de alta tensão do sensor amostra a tensão através de um divisor resistivo ou capacitivo. O sensor de corrente captura uma amostra do campo magnético do condutor através de um núcleo toroidal que é fechado ao redor do condutor gerando uma pequena tensão proporcional à corrente. Em ambos os casos não é necessário o desligamento da rede pois a operação pode ser executada através de varas de manobra. As amostras de tensão obtidas por cada sensor são injetadas num conversor frequência tensão que aciona um LED infravermelho conectado a uma fibra óptica multimodo. A parte em potencial de terra do sistema recupera o sinal senoidal dos pulsos de luz recebidos por um diodo PIN conectado no outro lado da fibra óptica. Depois da separação da portadora os sinais resultantes são proporcionais à corrente e à tensão respectivamente e podem ser enviados ao display ou ao registrador eletrônico para registro a longo prazo. Também é discutido um método para se energisar o transmissor do sensor utilizando-se uma fibra óptica que guia luz do receptor ao transmissor para lá ser convertida na energia elétrica necessária. Testes de linearidade mostraram erros menores do que 1% na faixa de 10 kV a 15 kV, comprovando a possibilidade de uso dos sensores para linhas de 13.8 kV.

CRISTAIS LíQUIDOS

Workshop: *Fluídos Magnéticos (LIQ, CRI, MMM, EST, MAT) – 08/06/94*

MAGNETIC RESONANCE IN ORIENTABLE ASSEMBLIES OF SINGLE-DOMAIN PARTICLES

RAIKHER, Y.

Departamento de Física, Universidade de Brasília

STEPANOV, V.

Institute of Continuous Media Mechanics, Perm, 614061, Russia

We consider magnetic resonance in a dilute suspension of identical single-domain ferroelectric particles. We assume that those particles possess a uniaxial magnetic anisotropy characterized by the internal field H_A and solve the problem in the framework typical to the experimental situation, where a strong constant field $H > H_A$ is normal to a weak alternating one $h < H_A$ and the spectrometer frequency $f = \text{constant}$; while taking out measurements, one is able to change the field strength H and the temperature T . On the basis of the kinetic equation for the orientational distribution function of the magnetic moment of a ferroparticle we have obtained the dynamic susceptibility $\chi(H, T)$ for an assembly of suspended particles and studied the absorption line $\chi''(H, T)$. The essential difference between the considered system and any solid disperse ferromagnet is that the suspension responds to scanning in H by transformation of the particle easy-axes distribution from almost isotropic to a sharp unidirectional one. This evolution changes the relative proportions between the superparamagnetic, internal crystalline and inhomogeneous contributions to the lineshape. In particular, the contour of $\chi''(H)$ might comprise two comparable peaks instead of one. Defining the linewidth ΔH conventionally as the peak-to-peak field distance in the graphs $d\chi''/dH$, we have found that the temperature dependence $\Delta H(T)$ should acquire a peculiar N -like form: ΔH tends to the internal crystalline linewidth at $T \rightarrow 0$, grows infinitely at $T \rightarrow \infty$ and has a maximum with the height $\sim 3H_A$ in the intermediate T range. Our results surmise that new, resonance-based, methods may be proposed to measure the orientational distributions and monitor the orientational processes in magnetic fluids and suspensions.

ESTRUTURA, ORDEM LOCAL E PROPRIEDADES ÓPTICAS DE FERROFLUIDOS IÔNICOS

FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 20516, 01452-990, São Paulo, SP, Brasil

Ferrofluidos são suspensões coloidais de pequenos grãos magnéticos (dimensões típicas de 100 \AA), dispersos em um fluido de transporte. Os ferrofluidos iônicos são obtidos [1] por síntese química e os grãos são carregados eletricamente de modo a se obter uma suspensão coloidal. Alguns tipos de ferrofluidos iônicos são o MnFe_2O_4 , $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$, (maguemita) e o CoFe_2O_4 . Uma das propriedades desses materiais é a indução de uma anisotropia óptica quando o ferrofluido está na presença de um campo magnético. Em particular, os ferrofluidos iônicos quando acondicionados em microslides de vidro (espessura $\sim 10^2 \mu\text{m}$) apresentam uma pequena birrefringência óptica ($\sim 10^{-4}$) mesmo na ausência do campo magnético. Essa birrefringência a campo nulo mostrou ser dependente da temperatura, apresentando um máximo em torno da temperatura $T \sim 45 \text{ }^\circ\text{C}$. Experiências de espalhamento central de raios-X realizadas no síncrotron de Orsay - França (LURE) [2] revelaram a existência de uma super-estrutura nos ferrofluidos à base de Mn. Os grãos magnéticos se aglomeram em pequenos "clusters" num arranjo hexagonal deformado. O ferrofluido de maguemita não mostrou a existência desses aglomerados. A birrefringência dos ferrofluidos tem origem nos fatores de despolarização da luz que incide nos grãos magnéticos anisométricos. Nesta palestra, além desses aspectos, abordaremos detalhes das experiências de óptica e espalhamento-X dos ferrofluidos iônicos.

[1] R. Massart, *C.R. Acad. Sci. Paris* **291c**, 1 (1980).

[2] M. F. da Silva and A.M. Figueiredo Neto, *Phys. Rev. E* **48**, 4483-4491 (1993).

SUPERPARAMAGNETISMO E RELAXAÇÃO MAGNÉTICA EM FERROFLUIDOS

RECHENBERG, H. R.

Instituto de Física, IFUSP

Ferrofluidos são dispersões coloidais de materiais ferromagnéticos em solventes apropriados. As partículas sólidas, com dimensões típicas da ordem de 10 nm, comportam-se magneticamente como uma coleção de dipolos clássicos de 10^2 - 10^3 magnetons de Bohr. A resposta a campos magnéticos variáveis é governada por dois mecanismos de relaxação, um ligado ao movimento browniano de rotação da partícula no fluido, e outro à flutuação coletiva dos spins em relação aos eixos cristalográficos. Serão discutidas as várias manifestações experimentais da relaxação, como o decaimento temporal da magnetização remanente, a dependência com temperatura e frequência da suscetibilidade AC, e as modificações na forma do espectro Mössbauer quando o tempo de relaxação se torna comparável ao período de Larmor hiperfino.

DIFFRACTION RESULTS IN ORIENTED FERROFLUIDS

AMARAL*, L. Q.

* *Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C.P.20516, 01452-990 - São Paulo, SP - Brasil*

TOURINHO†, F. A.

Departamento de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF - Brasil

Ionic ferrofluids with particles of γ -Fe₂O₃, MnFe₂O₄ and CoFe₂O₄ were studied by X-ray diffraction. The width of the strong (311) diffraction of the spinel structure gives information on the particle diameter. Films of CoFe₂O₄ particles obtained from ferrofluid added to a gel as well as dried, both in presence of a magnetic field, were also investigated by X-ray diffraction. No marked differences in line width were detected, what indicates no correlation between magnetic orientation and individual shape anisometry. But samples dried without gel in the magnetic field showed a noticeable difference in relation to samples trapped in gel: the intensity of the diffractions decreased with increasing scattering angle more strongly for samples without gel than for samples in gel. For the dried samples the decay was stronger for the condition $\vec{H} \parallel$ to scattering vector \vec{q} than for $\vec{H} \perp \vec{q}$. The decay in intensity, can be attributed to higher atomic mobility, possibly correlated to formation of string aggregates of the magnetic particles as ferrofluids lose water from the initial concentration (smaller than 1% in the case). Mobility of the particles would become anisotropic in such case, leading to anisotropic Debye-Waller factors.

Cristais Líquidos I (LIQ) - 09/06/94

ORIENTATIONAL INTERACTION OF A SOLID PARTICLE WITH A MONODOMAIN NEMATIC

RAIKHER, Y.

Departamento de Física, Universidade de Brasília

BURYLOV, S.

Transmag Institute, Dnepropetrovsk, 320005, Ukraine

A problem of equilibrium orientation of an elongated solid particle put inside a uniformly aligned nematic liquid crystal is studied. The particle is assumed to be sufficiently large so that the orientational distortions it causes may be treated in the framework of the continuum theory. Three kinds of anchoring of nematic on the particle surface are considered: two of the planar, and one of the homeotropic type. We prove that depending on the anchoring strength the stable orientation of the particle major axis may be either perpendicular (weak anchoring) or parallel (strong anchoring) to the unperturbed director of the liquid crystalline domain. The dimensionless parameter controlling the situation is the ratio ω of the transverse size of the particle to the extrapolation length of the nematic. The transition from the perpendicular to parallel orientation of the particle takes place at $\omega \sim 1$.

ESTUDO DAS TRANSIÇÕES DE FASES DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS DOPADOS COM POLI-ETILENO-GLICOL

SHIBLI, S. M.; ALVES, V. M.; THIEGHI, L. T.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

USP

O objetivo deste trabalho é o estudo interferométrico do efeito da adição do polímero poli-etileno-glicol (PEG) em cristais líquidos liotrópicos. Adicionamos quantidades crescentes de PEG a um cristal líquido liotrópico composto de laurato de potássio, decanol e água, que apresenta uma fase nemática-calamítica e observamos, através de medidas da birrefringência óptica, a evolução da sequência de fases em função da temperatura. Estudamos a topologia do diagrama de fases em função da concentração molar de PEG e verificamos que com o aumento da concentração de PEG este cristal passa a apresentar uma transição biaxial reentrante[1]. Assim, acima de $9,25 \times 10^{-7}$ n^o de moles de PEG o diagrama de fases deste cristal apresentará uma sequência discótica-biaxial-discótica, quando aumenta-se a temperatura. Observamos também que com o aumento da concentração de PEG de $1,13 \times 10^{-7}$ a $1,21 \times 10^{-6}$ n^o de moles ocorre uma diminuição no valor da birrefringência óptica no seu ponto máximo de $4,22 \times 10^{-3}$ para $8,63 \times 10^{-4}$ e, para o intervalo de concentração de PEG de $1,06 \times 10^{-6}$ a $1,21 \times 10^{-6}$ n^o de moles, vemos que as temperaturas críticas aumentam de 11,5 para 13,5°C para as transições nemáticas discótica-biaxial e, diminuem de 31°C para 20,5°C nas transições nemáticas biaxial-discótica, até atingir um ponto em que o diagrama de fases apresentará apenas a fase nemática-discótica, (para concentrações molares de PEG maiores que $1,28 \times 10^{-6}$ n^o de moles) transitando para a fase isotrópica a altas temperaturas ($T > 35^\circ\text{C}$). Ainda, apresentamos os valores obtidos para os expoentes críticos em função da concentração molar de PEG. Para amostras com fases discótica-biaxial-calamítica, sem qualquer presença de PEG, obtivemos expoentes críticos do parâmetro de ordem (β) igual a 0,38. A medida deste valor crítico determina que a transição discótica-biaxial deste cristal é descrita pelo modelo estatístico XY. Para a mesma amostra, agora contendo $3,8 \times 10^{-8}$ n^o de moles de PEG, verificamos que β aumenta para 0,40, o que está dentro do nosso erro experimental[2].

[1] M.J. de Oliveira e A.M. Figueiredo Neto, Phys. Rev. A34, 3481 (1986). [2] Z.A. de Sant'Ana e A.M. Figueiredo Neto, Phys. Rev. A46, 7630 (1992).

DINÂMICA HAMILTONIANA DOS CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS

PITANGA, P.

Instituto de Física - UFRJ

MUNDIM, K. C.; RIBEIRO FILHO, A.

Instituto de Física - UFBA

Mostramos que os cristais líquidos ferroelétricos podem ser reduzidos a sistemas hamiltonianos com dois graus de liberdade. O invariante de Lifshitz, no funcional Landau-Ginzburg, torna o sistema não integrável na presença de um campo magnético externo. Estudamos numericamente as soluções das equações de Hamilton analisando as seções de Poincaré do 2-torus. Estas seções nos permite descrever o comportamento espacial da estrutura molecular. Dependendo do campo magnético, a uma temperatura fixa, as seções de Poincaré revelam soluções características dos sistemas hamiltonianos bi-dimensionais não integráveis. A partir de um certo valor crítico do campo magnético as seções de Poincaré tornam-se muito complicadas. A complexidade destas seções podem ser explicadas pelo acoplamento da frequência azimutal ω_ϕ com a frequência tilt ω_θ . Este acoplamento ocasiona modos periódicos e modos quase periódicos, entre as oscilação helicoidal e tilt acarretando uma rota quase periódica para o caos. Devido a presença do termo de Lifshitz o comportamento qualitativo do sistema não linear pode ser obtido através do sistema linearizado, uma vez que este termo garante que os auto-valores da matriz de estabilidade tem parte real não nula. Usando este fato obtemos a estrutura do diagrama de fase de acordo com a teoria do campo médio. Mostramos que a transição smectic A - smectic C* é uma bifurcação de Hopf do campo vetorial hamiltoniano. Nas vizinhanças do ponto de Lifshitz a aproximação linear não é válida uma vez que as soluções dominantes são caóticas. As irregularidades observadas nas linhas de fase perto do ponto de Lifshitz, são ocasionadas pelo comportamento caótico da estrutura molecular.

ESTUDO DA TENSÃO SUPERFICIAL EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA NA TEORIA DE LANDAU.

BARBERO, G.

Politecnico di Torino

FONTANINI, S.; PALANGANA, A. J.; EVANGELISTA,

L. R.

DFI-UEM

A tensão superficial dos líquidos tem sido estudada, extensivamente, do ponto de vista da Mecânica Estatística (C. A. Croxton, e R. P. Ferrier, J. Phys. C4, 2433, 1971). Neste trabalho estudamos um meio na fase líquida que se transforma de uma fase de alta temperatura, caracterizada por um parâmetro de ordem $y = 0$, para uma fase de baixa temperatura na qual y é diferente de zero. Consideramos uma amostra planar semi-infinita na qual y varia somente como função de z , a coordenada cartesiana normal à interface situada em $z = 0$ (G. Barbero, Z. Gabbasova, e E. Miraldi, Mod. Phys. Lett. B5, 753, 1991). Aplicando a teoria de Landau, investigamos o efeito da energia de superfície sobre a transição de fase. O comportamento da tensão superficial e dos parâmetros de ordem no volume e na

superfície são determinados nas vizinhanças da temperatura crítica. Os resultados são confrontados com os dados experimentais existentes.

ESTUDO DE FASES ISOTRÓPICAS E NEMÁTICAS CILÍNDRICAS POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS.

TEIXEIRA, C. V.; ITRI, R.
IFUSP

Foram estudadas fases isotrópicas binárias concentradas de SLS/água próximo à transição isotrópica (I) \rightarrow hexagonal (H_α), e amostras ternárias de SLS/água/decanol, desde a fase isotrópica, abordando a transição $I \rightarrow$ nemática (N_c) e todo o domínio N_c , até a transição $N_c \rightarrow$ nemática discótica (N_d). A análise foi feita através da modelagem da intensidade espalhada, $I(q)$, expressa como um produto do fator de forma, $P(q)$, pela função de interferência entre partículas, $S(q)$. Os resultados mostram que houve crescimento das micelas na fase isotrópica binária e que o ajuste de cilindros é mais adequado do que o de elipsóides prolatos, fato esse que concorda com estudos teóricos sobre a estabilidade dos agregados em função de sua energia de curvatura. Já nas fases ternárias observamos o crescimento micelar, mas a forma cilíndrica não ajusta tão bem nas fases com mais decanol. Provavelmente deve estar ocorrendo também uma deformação da seção transversal da micela. Quanto ao domínio N_c , parece não haver mais crescimento das partículas, mas apenas uma deformação acentuada da seção transversal, onde as micelas tendem a adquirir a forma discótica, até que ocorra a transição $N_c \rightarrow N_d$. Essa observação confirma estudos teóricos sobre a competição entre o crescimento na direção longitudinal e na direção transversal.

PROCESSOS DE ORIENTAÇÃO EM CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS NAS FASES NEMÁTICAS UNIAXIAL E BIAXIAL

TURCHIELLO, R. DE F.; OLIVEIRA, E. A. DE
USP

Para cristais líquidos liotrópicos um campo magnético pode introduzir uma orientação uniforme em toda a amostra, inclusive nas superfícies de contorno. Para explicar esse fenômeno foi proposto um modelo de ancoramento baseado na existência de uma bicamada anfifílica nas interfaces. O processo de orientação nas camadas superficiais é da ordem de 10^3 vezes mais lento que o processo de orientação no volume. Neste trabalho apresentaremos resultados obtidos na investigação dos processos dinâmicos de orientação de um cristal líquido liotrópico no domínio das fases nemáticas biaxial e uniaxial calamítica. Utilizamos uma amostra composta de laurato de potássio (28,1%), de decanol (7,1%) de água que apresenta fase nemática biaxial (N_{BX}) entre 15 e 23,8° C seguida por uma fase nemática calamítica (N_C). A amostra, inicialmente uniformemente orientada, é submetida a uma deformação tipo "twist" aplicando-se um campo magnético H . Os processos de orientação são estudados a partir da medida da transmitância da amostra em função do tempo, observada entre polarizadores cruzados. Os resultados experimentais são comparados a valores de transmitância calculados a partir da configuração do diretor na amostra, onde os processos de orientação na superfície ocorrem com um tempo característico τ_s . Assim podemos testar diferentes tipos de configurações para o diretor tendo τ_s como parâmetro de ajuste. Os resultados obtidos demonstram uma dependência linear de τ_s com a temperatura em ambas as fases nemáticas. Para temperaturas decrescentes, há um decréscimo linear de τ_s mas a uma taxa maior na fase biaxial; para $H = 10$ kG, 30 seg/°C na fase N_{BX} e 3 seg/°C na fase N_C . O comportamento de τ_s com relação à temperatura é muito semelhante ao de um invariante do parâmetro de ordem. Observamos que na fase N_C , τ_s é proporcional a H^{-2} , como é previsto pelo modelo, porém a concavidade da curva $\tau_s(H)$ muda de sinal na fase N_{BX} .

Cristais Líquidos II (LIQ) - 09/06/94

DISPERSION EN LA RELAJACIÓN SPIN-RED POR RESONANCIA MAGNETICA NUCLEAR EN CRISTALES LIQUIDOS

PUSTOL, D. J.
Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba - Argentina

Los fenómenos de relajación que reflejan las propiedades de la dinámica molecular han sido, hasta ahora, muy poco estudiados en las escalas de tiempos correspondientes a los movimientos lentos y ultralentos. El método más adecuado para estudiar reorientaciones moleculares por RMN, es analizar la dependencia con la frecuencia de Larmor de la relajación espin-red^a. Experimentos de dispersión por relajación han dado resultados altamente satisfactorios, pero hasta hace unos pocos años eran restringidos a solamente algunos pocos casos particulares, debido esencialmente a problemas técnicos. Esto explica la razón por la cual el problema central de la relajación espin-red en sistemas parcialmente desordenados, esto es, clarificar la significancia y la distribución espectral de

los *movimientos moleculares colectivos* -fluctuaciones de orden del Director (OFD)-, aún no han sido comprobados satisfactoriamente desde el punto de vista experimental. Mientras que las propiedades de los *movimientos no colectivos*, como rotaciones moleculares (Rot) y autodifusión traslacional (SD) de moléculas individuales ya han sido bien estudiadas por medio de las técnicas convencionales.

En esta revisión se discuten los estudios recientes sobre la aplicación de la técnica de la RMN con ciclaje rápido del campo magnético para estudiar los procesos colectivos dinámicos que determinan la relajación nuclear en la escala de tiempo de los movimientos ultralentos.

^a"Dispersión por relajación", $T_1(\nu)$, R. Kimmich, Bull. Magn. Res., 1, 195 (1980), F. Noack, Prog. NMR Spectrosc., 18, 171 (1986)

ESTUDO DA BIRREFRINGÊNCIA INDUZIDA EM FERROFLUIDOS NO LIMITE DE CAMPO MAGNÉTICO NULO.

MATUO, C. Y.; FIGUEIREDO NETO, A. M.
Instituto de Física - USP

Utilizando um sistema de aquisição de dados (vide painel - LIQ) que nos permite realizarmos medidas de birrefringência (Δn) da ordem de 10^{-8} , estudamos o comportamento da birrefringência de ferrofluidos, próximo ao limite de campo magnético nulo. Realizamos este estudo para diferentes espessuras de amostras de ferrofluido, utilizando diferentes tipos de porta-amostras. Utilizamos capilares planos de vidro ("microslides") de 200 μm e 400 μm de espessura, e também uma cubeta de quartzo de 1 cm de espessura. Analisamos também o comportamento de Δn variando a concentração dos ferrofluidos. Através destes resultados podemos verificar a existência ou não de sinal de birrefringência com campo magnético nulo. Podemos também verificar o efeito de parede dos "microslides" na orientação dos ferrofluidos. Utilizamos neste estudo ferrofluidos iônicos de maguemita e de $CoFe_2O_4$ e ferrofluidos convencionais de base aquosa e base orgânica. Através dos resultados obtidos, verificaremos se os ferrofluidos (convencionais e iônicos) podem ser considerados fluidos isotrópicos ou anisotrópicos na ausência de campo magnético.

Apoio financeiro: FAPESP

CRESCIMENTO MICELAR EM FASES HEXAGONAIS LÍQUIDO-CRISTALINAS

AMARAL, L. Q. DO
INSTITUTO DE FÍSICA - USP

As fases hexagonais H, com ordem hexagonal bidimensional, eram vistas como sendo compostas por cilindros "infinitos". Entretanto a análise do comportamento do parâmetro da rede "a" em função da concentração C_v em volume de anfifílico, em sistemas anfifílico água, mostra que nem sempre isso é verdade. De maneira geral $a \propto C_v^{-x}$. Analisamos casos em que $x = 1/2$ (objetos infinitos e/ou flexíveis), $x = 1/3$ (objetos finitos rígidos) e $x < 1/3$ (crescimento micelar na fase H). Verificamos ainda que o tipo de comportamento (e valor

de x) depende da seqüência de transições de fases apresentada pelo sistema e das fases vizinhas à fase H. O caso $x = 1/3$ é exemplificado pelo sistema decilsulfato de sódio/água (L.Q.Amaral et al., Phys.Rev.A 46, 3548, 1992), com seqüência de fases isotrópica I-H. O caso $x = 1/2$ é exemplificado por sistema formado por derivado de guanosina em água (L.Q.Amaral et al., Liq.Cryst. 12, 913, 1992), com seqüência de fases I-colestérica-H. O caso $x < 1/3$ é exemplificado pelo sistema oleoil-lyso-phosphatidilcolina/água, com seqüência de fases I-H-cúbica bicontínua (P.Mariani & L.Q.Amaral, submitted). Esta sistemática de análise é estendida a outros sistemas de interesse biológico, permitindo obter informações sobre o processo de agregação de sistemas com auto-associação.

Este trabalho teve apoio financeiro da FINEP e do CNPq.

ENERGIA INTERFACIAL PARA CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS: ALÉM DA APROXIMAÇÃO ESFÉRICA.

BARBERO, G.
Politecnico di Torino
EVANGELISTA, L. R.
DFI-UEM
GIOCONDO, M.
Università della Calabria
PONTI, S.
Politecnico di Torino

O comportamento macroscópico de volume dos cristais líquidos nemáticos é bem descrito pela teoria elástico-contínua. As características físicas do meio nemático são levadas em conta na teoria através de coeficientes fenomenológicos como a permissividade dielétrica, a tensão superficial, as constantes elásticas e outros. Em muitos casos é possível conectar os parâmetros macroscópicos da teoria contínua às propriedades moleculares. Neste trabalho uma investigação detalhada das propriedades elásticas superficiais dos cristais líquidos nemáticos é realizada, fazendo-se uso de um modelo pseudo-molecular simples. Mostramos que na aproximação de Maier-Saupe para a interação intermolecular, supondo um volume de interação de forma elipsoi-

dal, as constantes de "splay" e "twist" são iguais, sendo diferentes daquela de "bend", no volume. Estudamos a dependência dessas constantes com a excentricidade do volume elipsoidal de interação. Na mesma direção mostramos que o número de parâmetros fenomenológicos necessários para a descrição do comportamento elástico superficial dos cristais líquidos nemáticos é diferente daquele no volume. Também a dependência posicional das constantes elásticas de superfície é avaliada, e a parte anisotrópica da tensão superficial é determinada.

Cristais Líquidos (LIQ) - 10/06/94

Estudo da fase isotrópica do Calf thymus DNA fragmentado por difração de Raios-X

CASTELLETTO, V.

Instituto de Física, Univ. de São Paulo

AMARAL, L. Q. DO

Instituto de Física, Univ. de São Paulo

ITRI, R.

Instituto de Física, Univ. de São Paulo

Em soluções aquosas, o DNA forma fases líquido-cristalinas altamente ordenadas, acima de uma concentração crítica dependente do comprimento das cadeias de DNA (aproximadamente 18%w/w para cadeias de 500 Å de comprimento) e quase insensível ao conteúdo de eletrólitos da solução (R.L. Rill *Physica* vol. A 1991, 87-176). A concentrações menores da crítica, o DNA apresenta uma fase isotrópica (T. L. Strzelecka e R. L. Rill *Nature* vol. 331 1988, 457-460). Neste trabalho estuda-se a fase isotrópica do calf thymus DNA fragmentado (500 Å de comprimento de cadeia), compreendida na faixa de concentrações 17%w/w - 1%w/w, utilizando técnica de espalhamento de raios-X. A determinação de alguns dos parâmetros estruturais das duplas hélices de DNA (raio de giro, raio e comprimento) permitiu fazer uma estimativa do seu tamanho nas soluções estudadas. Esta informação foi empregada na modelagem do fator de forma na fase isotrópica mais diluída. Os dados resultantes desta modelagem foram utilizados na obtenção da função de interferência das curvas de espalhamento das fases mais concentradas.

ESTUDO DA FORÇA IÔNICA EM FERROFLUIDO POR EPR.

PELEGRINI, F.; GONÇALVES, G. R. R.; TRONCONI, A. L.

UFG

MORAIS, P. C.; TOURINHO, F. A.

UNB

Utilizando a técnica de ressonância paramagnética eletrônica estuda-se o comportamento da força iônica em um fluido magnético a base de ferrita de manganês. A amostra de ferrofluido usada neste trabalho é uma solução coloidal a base de manganês $MnFe_2O_4$ quimicamente preparada, conforme o método desenvolvido por Massart e elaborada pelo prof. F.A. Tourinho (Química-UNB), consistindo de partículas magnéticas dispersas e suspensas em um líquido transportador, com diâmetro médio de 110Å. A força iônica para cada molaridade da amostra foi alterada, usando diferentes quantidades de ácido hipercloreto $HClO_4$ para a diluição. O modelo teórico empregado para analisar os resultados obtidos na banda-X de frequência à temperatura ambiente, considera a dependência da variação da largura de linha da ressonância magnética com a concentração de partículas no meio transportador e sua atividade iônica.

ESTUDO DE INTERAÇÕES ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS EM FERROFLUIDOS AQUOSOS POR EPR.

PELEGRINI, F.; PEREIRA, A. R.; TRONCONI, A. L.

UFG

MORAIS, P. C.; TOURINHO, F. A.

UNB

Neste trabalho são estudadas as interações entre partículas de uma espécie de ferrofluido iônico a base de água de $MnFe_2O_4$, através da técnica de ressonância paramagnética eletrônica (EPR). Os espectros de EPR são sensíveis às interações de natureza elétrica e magnética entre as partículas magnéticas em suspensão no líquido transportador. Para estudar estas interações considera-se as variações da distância média interpartículas, devido a mudança de molaridade da amostra. Para cada molaridade da amostra foi realizada uma bateria de medidas na banda-X de frequência variando a temperatura de nitrogênio líquido à ambiente. O comportamento da largura de linha de ressonância magnética é avaliado através da evolução dos espectros de EPR em função da temperatura, para cada concentração da amostra em estudo. Na análise dos resultados obtidos é aplicado o método dos momentos de Van Vleck (1948), onde a contribuição da interação magnética dipolar é tomada como a principal fonte de alargamento da linha de ressonância magnética.

UTILIZAÇÃO DO DENSÍMETRO NA IDENTIFICAÇÃO DE REGIÕES DE COEXISTÊNCIA DE LIOMESOFASES.

BARBOSA, A. A.; PINTO, A. V. A.
Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

Medidas de densidade relativa (onde a margem de erro é menor que 1 ppm - densímetro Anton PAAR), como função da temperatura (controlada com segurança até 5 mK - ultratermostato Heto-CB7), em sistemas liotrópicos, podem fornecer resultados, possivelmente inequívocos, quanto a coexistência de fases em transições de sistemas liotrópicos. Nossos dados obtidos com três diferentes surfactantes (n-Decilsulfato de sódio, n-Decilfosfato de sódio e n-Decilsulfonato de sódio), quando convenientemente tratados (ajuste e extrapolação de curvas para determinação de resíduos entre o comportamento da parte extrapolada e dados experimentais além da transição) permitem identificar claramente regiões de fases coexistentes no diagrama. Gráficos e resultados numéricos serão apresentados. Financiamento FUNCITEC 002/92.

SÍNTESE E ELABORAÇÃO DE DIAGRAMA DE FASES PARA O SISTEMA BINÁRIO n-DECILFOSFATO DE SÓDIO E ÁGUA.

BARBOSA, A. A.; PINTO, A. V. A.
Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

Nosso interesse ao produzir n-Decilfosfato de Sódio (DPNa), foi explorar seu diagrama de fases na busca de possíveis semelhanças/diferenças com os sistemas liotrópicos a base de n-Decilsulfato de Sódio (DSNa). Na elaboração do diagrama de fases foram usadas técnicas óptica e de espalhamento de raio-X. Nossas observações permitem concluir que: a) semelhantemente, aos sistemas a base de DSNa também o sistema com DPNa é termicamente instável. Em temperaturas (~ 80 C) e tempos (~ 3 h) relativamente moderados há hidrólise irreversível do surfactante; b) diferentemente do sistema com DSNa sistemas binários (DPNa + H_2O), em concentrações adequadas, podem produzir fase nemática (identificada com Nc sinal óptico negativo); c) não há dependência mensurável de \bar{s} , com a concentração de DPNa, ou temperatura, na fase nemática; d) a ocorrência de hidrólise moderada, não inibe a existência da fase nemática, mas desloca-a para temperaturas mais elevadas. Gráficos e resultados numéricos serão apresentados.

Financiamento FUNCITEC 002/92.

DIAGRAMAS DE FASES PARA OS SISTEMAS LIOTRÓPICOS ($DS_{nato}Na + DeOH + H_2O$) E ($DS_{nato}Na + DeOH + Na_2SO_4 + H_2O$)

BARBOSA, A. A.; PINTO, A. V. A.
Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

Tendo elaborado os diagramas de fases dos sistemas a base de n-Decilsulfonato de sódio ($DS_{nato}Na$), n-Decanol (DeOH), água e para o sistema quaternário incluindo Sulfato de Sódio (Na_2SO_4), a partir de exame de texturas no microscópio petrográfico, passamos a explorar as transições de fases com técnica de espalhamento de raios-X de baixo ângulo. Com esta finalidade desenvolvemos uma câmara ($mod(\bar{s})_{max} = 1,2 \cdot 10^{-2} A^{-1}$ para K_α do Cu), onde $mod(\bar{s}) = 2sen\theta/\lambda$, com temperatura controlada ($\Delta T = 0,1$ C). Além do aclaramento das fronteiras das transições de fases, onde coexistências de fases, não detectadas pelas técnicas ópticas, foram reveladas. Complementarmente exploramos a dependência de $mod(\bar{s})$ como função da temperatura e como função da concentração de DeOH (no sistema ternário) e de Na_2SO_4 (no sistema quaternário). No limite de nossa resolução ($\Delta mod(\bar{s}) = 1 \cdot 10^{-3} A^{-1}$, e na abrangência de concentração de nossos diagramas não se pode concluir que haja dependência significativa entre as variáveis estudadas. Gráficos e resultados numéricos serão apresentados.

Financiador FUNCITEC 002/92

ESTUDIO DE LA DISPERSION EN LA RELAJACION ESPIN-RED EN LA MESOFASE SMECTICA DEL 4-CHLOROPHENYL 4-UNDECYLOXYBENZOATE

ANOARDO, E.; PUSIOL, D. J.
Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba - Argentina

Se presenta un estudio experimental de la dependencia con la frecuencia de Larmor del tiempo de relajación protónico espin-red ($T_1(\nu_L)$), en el rango de $\nu_L = 7$ a 30 MHz. Se encontró que la relajación longitudinal es bi-exponencial. Uno de los tiempos fué asignado a los protones que pertenecen a la cadena alquílica, $T_1^{alkyl}(\nu_L)$, el cual no presenta signos de relajación cruzada entre los protones que se observan y los núcleos cuadrupolares de cloro. El segundo decaimiento se asignó a los protones pertenecientes al carozo molecular. Un fuerte acoplamiento que produce relajación cruzada entre cloros y protones fué observado, manifestándose como 'dips' en la curva de dispersión. La forma de los dips se ajusta de acuerdo a un modelo de forma del espectro cuadrupolar obtenido previamente por medio de RCN pura en sistemas incommensurados y vidrios orgánicos.

MEDIDAS DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA DE UM CRISTAL LÍQUIDO NEMÁTICO LIOTRÓPICO.

VILARIM, P. R.; CANHA, M. A.; LIMA, W. M.;
PALANGANA, A. J.
DFI-UEM

A determinação de parâmetros térmicos é fundamental no campo de investigação dos cristais líquidos, para identificar mesofases e caracterizar transições de fase. Em particular, o conhecimento da condutividade térmica desempenha papel relevante na formulação de modelos teóricos para o estudo das instabilidades térmicas e fenômenos não lineares nos referidos sistemas. Neste trabalho, estamos realizando medidas de condutividade térmica na mesofase nemática calamítica, através de uma técnica convencional de medidas. O arranjo experimental consiste de duas placas metálicas aquecidas e resfriadas, adequadamente, em banhos termostáticos com controle de temperatura. A amostra nemática previamente orientada no campo magnético (entre lâminas de vidro tomadas como padrão), é inserida entre as placas. Dessa forma, as condutividades térmicas paralela e perpendicular da amostra nemática são determinadas a partir das diferenças de temperaturas, espessuras, e da condutividade térmica das lâminas de vidro. A mesofase nemática é obtida, nas concentrações de interesse, do sistema liotrópico composto de laurato de potássio, decanol e água. Estamos investigando, também, o comportamento desses parâmetros em função da temperatura no domínio da referida fase.

UMA ABORDAGEM MOLECULAR PARA O CÁLCULO DAS CONSTANTES ELÁSTICAS EM CRISTAIS LÍQUIDOS.

HIBLER, I.; PALANGANA, A. J.; EVANGELISTA, L. R.
DFI/UEM

As propriedades elásticas dos cristais líquidos podem ser descritas por uma densidade de energia livre que depende das deformações locais através de um conjunto de constantes elásticas. O cálculo dessas constantes elásticas tem sido desenvolvido a partir de diversos modelos teóricos (E. Govers and G. Vertogen, *Liq. Cryst.*, 2,31 (1987)) que diferem, basicamente, no potencial de interação molecular ou na forma do volume de interação efetivo considerado para cada molécula. Neste trabalho propomos um modelo molecular onde o cálculo das constantes elásticas é desenvolvido considerando-se outras formas realísticas para o potencial e para o volume de interação efetivo, com particular atenção às peculiaridades de um meio nemático liotrópico. Uma comparação com dados experimentais é também apresentada.

PROJETO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO E DE SEUS CIRCUITOS DE ACIONAMENTO

PAZZETTI, A. C. B.; ALMEIDA, L. A. C. DE;
MAMMANA, A. P.; MAMMANA, C. I. Z.
Fundação Centro Tecnológico para Informática - IM - LMI

Objetivando produzir protótipos de mostradores para o desenvolvimento de novos produtos pela indústria, o LMI/IM/CTI tem se empenhado no estabelecimento de uma metodologia de projeto das células e das máscaras e na geração automática das artes finais, visando o ciclo rápido de projeto. Tem também se ocupado do desenvolvimento dos circuitos para seu acionamento e das técnicas de montagem dos módulos. A partir dos resultados estatísticos dos processos de fabricação das máscaras e dos mostradores, obtidos desde 1990, foram estabelecidas regras de projeto dos dispositivos procurando-se compatibilizá-las com os padrões internacionais. Através do desenvolvimento das máscaras de forma integrada com os processos no sentido de melhorar o desempenho eletro-óptico e a confiabilidade dos dispositivos finais, sem comprometer o rendimento e a capacidade de produção da linha, tem-se alcançado uma otimização dos processos, principalmente dos fotolitográficos, buscando-se reduzir as dimensões das configurações, aumentando-se sua densidade e a área de exibição. Circuitos analógicos e digitais vêm sendo desenvolvidos para o endereçamento de mostradores estáticos e multiplexados, buscando estabelecer estratégias de projeto que permitam otimizar o desempenho eletro-óptico. O Laboratório vem ainda desenvolvendo sistemas eletrônicos completos, como relógios e cronômetros digitais, painéis de informação e automotivos, de modo a demonstrar as vantagens em termos de desempenho, consumo, portabilidade e confiabilidade.

AVANÇOS NA FABRICAÇÃO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO NO IM/CTI

ALMEIDA, L. A. C. DE; PEREIRA, C. C.; ALVES, G.
P.; AMARAL, A. C. C. DO; SCHREINER, M. A.;
MAMMANA, A. P.; MAMMANA, C. I. Z.
Fundação Centro Tecnológico para Informática - IM - LMI

Consciente de que o desenvolvimento de novos produtos de eletrônica depende da disponibilidade local de mostradores de cristal líquido, o LMI/IM/CTI vem produzindo pequenas séries de mostradores com características especiais para a aplicação pela indústria em seus protótipos. Desde 1990 trabalhando no desenvolvimento dos próprios equipamentos e processos produtivos, o LMI vem procurando estabelecer processos con-

trolados, eficientes e rápidos para atendimento à demanda de pequenos lotes de mostradores de áreas até 150 mm x 150 mm, estáticos e multiplexados. Através da formação de seus próprios recursos humanos para o desenvolvimento e a operação da linha piloto, o laboratório vem ascendendo a curva de aprendizagem, estando hoje em condições de produzir dispositivos com qualidade assegurada. Neste trabalho são apresentados os resultados mais importantes alcançados em 1993 em termos dos equipamentos e processos, do desempenho eletro-óptico e da qualidade e confiabilidade finais. Também é avaliada a capacitação adquirida no desenvolvimento de novos dispositivos afins com a tecnologia de mostradores de cristal líquido nemático torcido.

RELAÇÕES ENTRE ANCORAMENTO DE CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS E TOPOLOGIA DOS PORTA-AMOSTRAS

ALVES, V. M.; OLIVEIRA, E. A. DE
USP

Em investigações científicas envolvendo cristais líquidos os porta-amostra utilizados frequentemente são "microslides" comercialmente disponíveis. Os cristais líquidos são introduzidos nesses "microslides" através de fluxo, o que em geral implica em uma orientação preferencial ao longo da direção de escoamento do líquido. Observamos alguns "microslides" de secção reta retangular (espessura entre 200 e 50 μm e largura de 1 a 2 mm) apresentam ondulações nas superfícies internas. Essas ondulações, combinadas com o fluxo introduzem uma direção preferencial de orientação para o cristal líquido. Utilizamos "microslides" com ranhuras para estudar as propriedades de ancoramento de cristais líquidos liotrópicos e observamos que um campo magnético pode introduzir uma orientação diferente da inicial que se estende uniformemente pela amostra. Porém, quando o campo externo é desligado a orientação inicial é reestabelecida. O tempo característico desse processo de relaxação τ_r é bastante longo (2 a 16h) e não pode ser explicado pelos modelos de ancoramento conhecidos para cristais líquidos termotrópicos. Os resultados experimentais mostram ainda que τ_r está relacionado a espessura do porta-amostra (como é esperado para termotrópicos com ancoramento forte) e também à largura do "microslide". Isto nos levou a formular a hipótese de que a topologia do porta-amostra determina um tipo de orientação preferencial. Estudamos também os processos de orientação de cristais líquidos liotrópicos em porta-amostras de quartzo, com superfícies internas lisas (de boa planicidade) e com topologias diferentes; um porta-amostra retangular, com secção reta retangular e outro cilíndrico, ambos com espessura de 200 μm . Os resultados obtidos, indicam que o tempo característico

do processo de orientação, τ_s , nesses porta-amostras é inversamente proporcional a intensidade do campo magnético; $\tau_s \sim H^{-1}$. Utilizando "microslides" de mesma espessura, e com superfícies internas lisas (planicidade $\sim \lambda/4$) obtivemos $\tau_s \sim H^{-2}$.

TRANSIÇÕES DE FASE E VISCOSIDADE EM CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS COLESTÉRICOS

ALCANTARA, M. R.; SANT'ANA, Z. A. DE; VANIN, J. A.
USP

No presente trabalho foram feitos estudos de transição de fase e reologia em uma mesofase à base de laurato de potássio, cloreto de decilamônio, água e sulfato de brucina heptahidratado. A amostra foi caracterizada por microscopia ótica como sendo colestérica calamítica abaixo de 15°C, biaxial entre 15°C e 30°C, discótica entre 30°C e 45°C e fase isotrópica acima de 45°C. Para as medidas de viscosidade utilizou-se um reômetro Brookfield, tipo Cone-Placa. Na temperatura de 15°C, o sistema mostrou um comportamento pseudo-plástico e um aumento da viscosidade com o tempo para uma taxa de cisalhamento constante, correspondente ao comportamento típico de sistemas tixotrópicos. O mesmo sistema analisado à temperatura mais elevada (33°C) mostrou-se pseudo-plástico para uma baixa taxa de cisalhamento, mas com alta taxa de cisalhamento ele se torna newtoniano, mostrando uma possível competição entre as forças de cisalhamento e as forças de interação entre as micelas. Observou-se também uma diminuição de viscosidade com o tempo, característica de sistemas reopéxicos. É interessante ressaltar que o sistema investigado tem comportamento pseudo-plástico em relação à taxa de cisalhamento em todo o intervalo de temperatura avaliado, embora altere a dependência temporal da viscosidade (de tixotrópico para reopéxico) com o aumento da temperatura. (FAPESP)

ESTUDO DE DIAGRAMA DE FASES TRIANGULARES DE MISTURAS LIOTRÓPICAS COM ÊNFASE EM FASES DO TIPO REVERSO.

MAGALHÃES, M.; FIGUEIREDO NETO, A. M.
INSTITUTO DE FÍSICA - USP

Na investigação sobre a existência de fase de cristal líquido nemático do tipo reverso, para três sistemas ternários diferentes e um quartenário, observamos as diferentes topologias de diagramas de fases quando mudávamos o solvente (DeOH, HEP, PROP).

Os sistemas estudados foram:

- 1) AOT/DeOH/H₂O
- 2) AOT/HEP/DeOH/H₂O
- 3) AOT/PROP/H₂O

onde

AOT = Di (2 etil exil) Sulfaccionato de Sódio;

DeOH = 1-Decanol

HEP = Heptano

PROP = 2-Propanol

No primeiro sistema não foi encontrada a fase nemática reversa. Encontramos a hexagonal, a lamelar, gel e a isotrópica. Ao mudarmos o solvente para o heptano e doparmos com DeOH (mantendo uma relação molar de 3:1 de AOT:DeOH) observamos fases hexagonais (com parâmetro de rede em torno de $a = 34 \text{ \AA}$) com concentrações molares maiores de AOT + DeOH, mantendo aproximadamente a mesma concentração de solvente que a do sistema anterior. O terceiro sistema apresenta fases com dois arranjos lamelares (com parâmetro de rede em torno de $a = 24,5$ e $21,9 \text{ \AA}$, quando variamos a temperatura de $23,5$ até $39,9 \text{ }^\circ\text{C}$) com concentrações molares menores de H_2O (em torno de 70 %) em relação ao primeiro sistema. Este apresenta a fase lamelar em regiões próximas ao máximo de H_2O e mínimos de AOT e de DeOH, em % molar. Assim, verificamos a influência do tamanho das cadeias carbônicas dos componentes na topologia dos diagramas de fases.

Uma fase nemática do tipo normal de $\text{H}_2\text{O}/\text{DeOH}/\text{LK}$ (Laurato de Potássio) foi preparada com concentrações [95,66 % molar, 1,20, 3.14]. A partir desta, concentramos em LK mantendo, inicialmente, a concentração de DeOH fixa, a fim de obtermos fases hexagonais e comparar suas texturas e difrações de raios-X com as reversas já encontradas.

As texturas foram observadas em microscópio óptico de luz polarizada. Os parâmetros de rede foram medidos através do registro em filmes da difração de raios-X, em geometria de Laue.

Apoio financeiro CNPq-RHAE.

SISTEMA DE MEDIDA DA BIRREFRINGÊNCIA ÓPTICA (ESTÁTICA E DINÂMICA) DE FERROFLUIDOS UTILIZANDO UM MODULADOR FOTOELÁSTICO.

MATUO, C. Y.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física - USP

Ferrofluidos apresentam birrefringência (Δn) quando submetidos a campos magnéticos. No caso da medida da birrefringência estática, utilizamos um modulador fotoelástico colocado em um sistema óptico. O modulador é colocado entre o polarizador e a amostra de ferrofluido. O modulador modula em 50 kHz a fase do sinal entre duas direções perpendiculares. Um "lock-in" compara o sinal elétrico recebido por uma foto-célula ao sinal de referência do modulador fotoelástico, fornecendo a componente de mesma frequência. Essa componente pode ser relacionada com a birrefringência. Através deste sistema, podemos obter medidas de Δn da ordem de 10^{-8} . Para medida da birrefringência dinâmica, utilizamos campos magnéticos pulsados (periódicos e não periódicos) gerados por uma

bobina de Helmholtz, conectada a um gerador de pulsos elétricos quadrados. Através de um "lock-in" e de um osciloscópio digital, podemos analisar a birrefringência induzida pelo campo na amostra. Através de medidas da relaxação de Δn com o tempo, podemos medir a viscosidade da amostra investigada.

Apoio financeiro: FAPESP

NOVO MÉTODO DE MEDIDA DE POLARIZAÇÃO ELÉTRICA DE CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS

MARTINS, O. G.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física - USP

Há dois métodos tradicionais de medida de polarização elétrica (P) de cristais líquidos ferroelétricos. O método de Diamant^a utiliza excitação senoidal e apresenta inconvenientes em baixa frequência e alta tensão de excitação^b. O método de Martinot-Lagarde^c e Miyasato et al^d não apresenta diretamente o valor da polarização e utiliza um microcomputador para realizar a integração de dP/dt às compensações necessárias. Desenvolvemos um método que é praticamente a síntese dos métodos anteriores. O novo método excita a amostra com uma onda quadrada, contornando o problema da não linearidade da corrente iônica, e realiza a compensação da capacitância da amostra e a integração analogicamente. A variação das cargas para uma excitação em degrau pode ser observada em tempo real, portanto. O método foi testado com uma amostra de DOBAMBC e foi obtida polarização de $6,0 \pm 0,5 \text{ nC/cm}^2$ ($T = T_c - 15 \text{ }^\circ\text{C}$) e um expoente $\beta = 0,35 \pm 0,03$ para $P = P_0 (T_c - T)^\beta$.

Apoio financeiro: CNPq

^aH. Diamant, K. Drenck, R. Pepinsky, Rev. Sci. Instr., 28, 30 (1957).

^bS. Kai, T. Hashimoto, K. Ose, M. Imasaki, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 130, 143 (1985).

^cPh. Martinot-Lagarde, J. Phys., 38, L-17 (1977).

^dK. Miyasato, S. Abe, H. Takizae, A. Fukuda, E. Kuze, Jpn. J. Appl. Phys. Partz, 22, L221 (1983).

ESTUDO COMPARATIVO DAS MISTURAS LIOTRÓPICAS LAURATO DE POTÁSSIO(LK)/CLORETO DE DECIL AMÔNIO(DaCl)/ÁGUA(H₂O).

PEREIRA, R. A. R.; FIGUEIREDO NETO, A. M.

Instituto de Física - USP

Apresentamos neste trabalho um estudo comparativo entre as misturas liotrópicas LK/DeOH/H₂O e LK/DaCl/H₂O, onde mantivemos constante a concentração molar do anfílico LK. Queremos compreender o que acontece quando substituímos a molécula de DeOH por DaCl. Essa substituição alterou as temperaturas de transição e toda a topologia do diagrama de fases. Estudos sobre a estrutura microscópica da mistura contendo DaCl levaram à conclusão que o DaCl desempenha um papel semelhante ao do decanol. Sabe-se também, que

as moléculas de DeOH na mistura LK/DeOH/H₂O se localizam de forma preferencial nas regiões mais planas da micela e como as moléculas de DaCl e DeOH possuem cadeias parafínicas de mesmo comprimento (10 carbonos), espera-se portanto o mesmo para as misturas com DaCl. Observamos duas amostras, uma com DaCl, outra DeOH e $M_r = [LK/[DaCl=4]]$ (onde [] representa a concentração molar da substância), na faixa de temperatura de 10 °C à 50 °C. Para a mistura contendo DeOH observamos a presença da fase nemática calamítica desde os 10 °C, evoluindo para uma fase infinita a partir dos 34 °C; para a contendo DaCl, observa-se uma região polifásica desde os 10 °C tornando-se completamente isotrópico a partir dos 25 °C. Este trabalho evidenciou de maneira contundente que a substituição do DeOH pelo DaCl alterou substancialmente a topologia do diagrama de fases. Como a cadeia carbônica das duas moléculas é a mesma, a diferença introduzida pela região polar foi fundamental para essa mudança topológica. A região polar do DaCl sendo maior do que a do DeOH e os contraíons de sinais opostos deve ter uma influência marcante na curvatura da superfície das micelas.

Apoio financeiro: CNPq/RHAE

SISTEMA PARA O PREENCHIMENTO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO

FARNETANE NETO, ; OÑATE, M. R. T.; PEREIRA, C. C.; ALVES, G. P.; ALMEIDA, L. A. C. DE; MAMMANA, A. P.; MAMMANA, C. I. Z.

Fundação Centro Tecnológico para Informática - IM - LMI

Consciente de que o domínio da tecnologia de mostradores de cristal líquido depende da capacitação no projeto e construção dos equipamentos empregados em sua fabricação, caracterização e teste, o LMI vem envidando intensos esforços no desenvolvimento de sistemas simples que permitam realizar processos adequados para atender à demanda em termos de grande diversificação e pequenas quantidades. Dentre os diversos sistemas desenvolvidos, destaca-se o de preenchimento, à vácuo, das células capilares com o cristal líquido. De concepção simples, o sistema possui uma cuba onde é colocado o cristal líquido e uma câmara de sucção de paredes móveis, suportada por uma moldura de neoprene expandido, que garante sua vedação. Esta câmara tem altura ajustável para receber células de diferentes alturas (até um máximo de 200 mm), estando a largura máxima limitada em 150 mm, comportando uma única célula ou várias células posicionadas lado a lado. As paredes da câmara são transparentes e recobertas com polarizadores para permitir observar o cristal líquido durante a sucção. A cuba foi projetada de forma a minimizar as perdas do cristal líquido por molhamento das superfícies externas das células. A câmara é evacuada por uma válvula geradora de vácuo Festo, operada com a linha de ar comprimido do laboratório, tendo acoplado um dispositivo supressor de ruído. Para uma

pressão na linha de 6 bar, o vácuo alcançado na câmara é de cerca de 4 inHg, o que permite preencher, com cristal E7 (viscosidade de 40 cst), em apenas 3 minutos, três células de 50 mm x 90 mm. O sistema vem sendo plenamente utilizado na linha piloto de fabricação de mostradores de cristal líquido do IM/CTI, apresentando como resultados importantes, além da versatilidade, rapidez e eficiência, um maior controle no processo, com a regulação do fluxo do cristal, a minimização das bolhas e a redução da contaminação.

TRANSIÇÃO DE FORMA NA FASE ISOTRÓPICA DO SISTEMA BINÁRIO

APFO/D₂O

OURIQUES, G. R.

UFSC

Experimentos de condutividade elétrica, espalhamento de raios-X a altos e baixos ângulos e difusão molecular (NMR) tem sido utilizados no estudo da forma das micelas na fase isotrópica da mistura binária de amônio pentadecafluorooctanoato e água deuterada (APFO/D₂O). A análise dos resultados experimentais mostram consistentemente a existência de uma transição de forma dos agregados micelares similar a uma segunda concentração micelar crítica cmc, onde as micelas mudam de uma geometria cilíndrica, em baixas concentrações de APFO ($W_A \leq 0.27$) para discos, nas concentrações mais altas ($W_A \geq 0.28$). Cálculos teóricos dos coeficientes de difusão micelar foram realizados e comparados com os valores experimentais obtidos para várias amostras de diferentes concentrações de surfactante. As curvas dos gráficos de D_T versus W_A usando os dois métodos mostram uma pequena discrepância nos valores de D_T mas são qualitativamente similares.

FORMA, TAMANHO E ESTRUTURA MICELAR NA MISTURA BINÁRIA

APFO/D₂O (Concentração: $0.29 \leq W_A \leq 0.66$)

OURIQUES, G. R.; SANDER, R. B.

UFSC

A forma, estrutura e tamanho das micelas no sistema binário Amônio Pentadecafluorooctanoato/Água Deuterada (APFO/D₂O) tem sido investigados por difração de raios-X a baixos ângulos. Este sistema binário possui três fases líquido cristalinas micelares homogêneas: isotrópica (I), nemática (N_D) e lamelar (L_D). Destas, a fase micelar nemática é a mais intrigante pois é estável em uma região grande de concentração e temperatura; estabilidade esta não prevista pelas teorias mecânico-estatísticas. A fase lamellar é formada de micelas do tipo "disc-like" como na fase nemática, mas arranjas em planos formando camadas de surfactantes (como nas fases esmélicas encontradas nos cristais líquidos termotrópicos) intercaladas por camadas de água. Esta interpretação é sustentada

pelo fato de não haver descontinuidade no tamanho micelar médio ao cruzar a linha de contorno da transição de fase nemático/lamelar.

MEDIDAS DE DENSIDADES E COEFICIENTES DE EXPANSÃO EM LIOMESOFASES NEMÁTICAS, HEXAGONAIS E ISOTRÓPICAS.

BARBOSA, A. A.; PINTO, A. V. DE A.

Grupo de Cristais Líquidos da UFSC

Investigamos, para três diferentes surfactantes (n-Decilsulfato de Sódio, n-Decilsulfonato de Sódio e n-Decilfosfato de Sódio), a dependência de densidades de fases liotrópicas como função da temperatura, usando um densímetro Anton PAAR. Com base nas taxas de variação das densidades como função da temperatura, calculamos os coeficientes de expansão térmica para as fases nemáticas, hexagonais e isotrópicas. Embora as densidades sejam significativamente diferenciadas (entre 1,03 e 1,09 g/cm³), para diversos surfactantes, os coeficientes de expansão térmica não mostraram grande oscilação (entre 5 e 6.10⁻⁴ C⁻¹). Se temos em conta que, para os sistemas estudados a água tem fração molar majoritária (>90%); e que o coeficiente de expansão térmica da água é da ordem de 2.10⁻⁴ C⁻¹ percebe-se que as diferenças moleculares entre os surfactantes, não são capazes de modificar significativamente esta propriedade macroscópica dos liotrópicos. Este, na verdade, é um resultado esperado se temos em conta a alta diluição do surfactante mas depõe contra a suposta estruturação da água ditada pela adição de quantidades moderadas de surfactantes. Gráficos e resultados numéricos serão apresentados. Financiamento FUNCITEC 002/92.

SISTEMA COMPUTACIONAL PARA APOIO À FABRICAÇÃO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO

TERIN, P. S. D.; UEDA, V. L. M.; ALMEIDA, L. A. C. DE; SCHREINER, M. A.; MAMMANA, A. P.; MAMMANA, C. I. Z.

Fundação Centro Tecnológico para Informática Instituto de Microeletrônica - Laboratório de Mostradores de Informação

O Laboratório de Mostradores de Informação vem produzindo, sob demanda, pequenas séries de mostradores de cristal líquido para o desenvolvimento de novos produtos. Pela própria natureza das atividades e pela complexidade dos processos realizados, um grande volume de informações deve ser produzido, tratado, armazenado e consultado. Para que essas operações possam ser realizadas com rapidez, eficiência, segurança, confiabilidade e facilidade de acesso por profissionais de diferentes formações, está sendo desenvolvido um sistema

computacional que, além dessas funções, deve apoiar o planejamento das atividades, a alocação dos profissionais e o inventário de materiais utilizados, viabilizando ciclos rápidos e flexíveis de produção. O sistema está sendo desenvolvido para uma rede de microcomputadores PC 386, fisicamente distribuídos nas salas limpas de processamento e nos demais laboratórios de projeto e caracterização. Dispõe de três bancos de dados estruturados principais: o de receitas detalhadas dos processos, o de dados sobre os processos realizados (ordens de serviço dos lotes processados, com parâmetros dos processos, tempos, materiais empregados, executores, testes de acompanhamento, etc.) e o de resultados das medidas e caracterizações dos dispositivos finais. Cerca de quatro centenas de receitas e ordens de serviço já executadas, bem como resultados de lotes processados, estão disponíveis no sistema para consulta. Já propiciando acompanhar a evolução da tecnologia desenvolvida no LMI, o sistema foi projetado de forma modular, devendo agregar novos módulos funcionais que integrem as demais atividades do Instituto de Microeletrônica, no projeto e fabricação de máscaras e circuitos integrados, no encapsulamento eletrônico, na análise da qualidade e da confiabilidade e na caracterização e análise de falhas.

MISCELLAR FLUCTUATIONS IN A CALAMITIC NEMATIC PHASE OF A LYOTROPIC LIQUID CRYSTAL STUDIED BY PHOTON CORRELATION

SANTOS, M. B. L.; FERREIRA, W. B.; AMATO, M. A.

Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910, Brasília, DF

Using a Rayleigh scattering light beating technique, we have made new measurements on the slow polarized fluctuations, previously identified as being of micellar origin, for a lyotropic system consisting of Klaurate, decanol, D₂O and presenting only the uniaxial calamitic nematic (N_c) phase (from among the three known nematic types: uniaxial disk-like (N_D), calamitic (N_c) and biaxial (N_B) phases). An elaborated analysis of these data is made in order to clarify the relationship between the light scattering signals coming from the micellar fluctuations and those from (classical) orientational fluctuations. The main conclusions of this analysis are that the micellar mode is independent of the temperature and wave-vector, and that its relaxation frequency is substantially lower than that found previously for the same lyotropic components, but presenting the biaxial nematic phase. Finally, some considerations are made of the possible relationships between the micellar fluctuations and the structural properties of lyotropic-nematics.

CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Workshop: Otimização Termo-
dinâmica e Diagrama de Fases (MAT)
– 08/06/94

DIAGRAMAS DE FASES Pr-Fe-B e Sm-Ti-Fe E SUA IMPORTÂNCIA PARA A COMPREENSÃO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE ÍMÃS PERMANENTES DESTES SISTEMAS

NEIVA, A. C.

Lab. de Materiais Magnéticos, Depto. de Física dos Materiais e Mecânica, IFUSP

As propriedades magnéticas de ímãs permanentes – em especial a coercividade – são extremamente afetadas pela sua microestrutura. Para o controle da microestrutura, os diagramas de fases são ferramentas importantes. Descreve-se neste trabalho a obtenção dos diagramas Pr-Fe-B e Sm-Ti-Fe, e discute-se, com base neles, a potencialidade da produção de ímãs permanentes baseados nas fases $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ e SmTiFe_{11} , respectivamente. O diagrama Pr-Fe-B é descrito através de quatro seções verticais, uma seção politérmica e um diagrama de Scheil. Determinaram-se quatro reações invariantes: um máximo peritético, um máximo eutético, uma reação de transição e uma reação degenerada. O diagrama Pr-Fe-B é qualitativamente semelhante ao diagrama Nd-Fe-B, podendo-se assim obter ímãs Pr-Fe-B e Pr-Nd-Fe-B com microestrutura semelhante aos dos ímãs Nd-Fe-B, e através de processamento semelhante. O diagrama Sm-Ti-Fe, por sua vez, é descrito por meio de uma seção isotérmica a 1000°C . Observa-se que a fase SmTiFe_{11} forma equilíbrios apenas com fases ferromagnéticas. A presença destas fases em contorno de grão e a ausência de alguma fase intergranular não-ferromagnética explicariam a baixa coercividade observada em ímãs sinterizados baseados em SmTiFe_{11} .

Phase Diagrams Experimental Studies: Systems *Al-Fe-Nb* and *Fe₁₇Nd₂-N*

GAMA, S.; BEJARANO, J. M. Z.; RIBEIRO, C. A.

UNICAMP

FRIES, S. G.; LUKAS, H. L.

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaft, PML, Stuttgart, Germany

Phase relations studies in alloy systems are important for the obtention of new materials or materials with non conventional microstructures. The techniques for phase diagram studies span from the conventional ones, used by the metallurgists, as optical metallography, differential thermal analysis, X-ray diffraction, diffusion couples, and more specific and sophisticated techniques as scanning and transmission electron microscopy, electrical resistivity measurements, thermomagnetic analysis, and others. Systems based on *Al* and *Nb* present prospect as structural materials for high temperature applications. We undertook an experimental study of the phase relations on the binary system *Fe-Nb* and on the ternary system *Al-Fe-Nb*. The results for the *Fe-Nb* system confirm the existence of two intermetallic phases with stoichiometries Fe_2Nb and $\text{Fe}_{21}\text{Nb}_{19}$, and the peritetic formation of this last compound. We confirmed that the phase Fe_2Nb_3 is metastable in this system, forming only in situations of very low cooling rates. In the case of the ternary system we built the 1000°C isothermal section, and detailed how the *Fe-Nb* binary

phases dissolve *Al*. A new *Nb*-rich ternary phase has been pointed out.

In the case of the Fe_{17}R_2 (*R* = rare earths), there is the interest of using the nitrated phase with *R* = *Sm* as a material for high performance hard magnets. In order to understand the nitrogen diffusion process, we did some diffusion experiments using the phase $\text{Fe}_{17}\text{Nd}_2$. The interpretation of the experiments as diffusion couples, where one of the elements is the gas, led us to the proposition of a new model for the formation of the nitrated phase. Measurements of thermomagnetic analysis, optical metallography, X-ray diffraction and electron microprobe analysis confirm the proposed model.

Thermodynamic Optimization of Phase Diagrams: Its Importance and Some Applications

FRIES, S. G.; LUKAS, H. L.

Max-Planck-Institut für Metallforschung, Institut für Werkstoffwissenschaft, PML, Stuttgart, Germany

GAMA, S.

UNICAMP

A knowledge of phase equilibria is fundamental to all aspects of materials science. A modern method to provide this knowledge for a particular application is by thermodynamic calculation of the equilibria using data stored in a computer database. For computer application, the data are stored as analytical expressions for the thermodynamic functions of state and as numerical values of the adjustable parameters of these expressions. The analytical expressions are derived from more-or-less simplified models of statistical thermodynamics. The technique to obtain the optimized thermodynamic description has shown up its importance *not only* for the phase diagram calculation and extrapolation to higher order systems but it is also being used by experimental researchers as a tool to test the compatibility between their own experimental results and the data found in the literature. During a long time, optimizations are being done at the Max-Planck Institut, at Stuttgart, and some experience was gathered in the process. The progressive understanding of this technique can be shared by showing up some procedures and illustrating them with some examples.

CARACTERIZAÇÃO DE COMPOSTOS DO SISTEMA Nb-Si PRODUZIDOS POR FUSÃO EM FORNO E FUSÃO ZONAL.

PERDIGÃO, M. N. R. V.; BOTTA FILHO, W. J.

Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos

OLIVEIRA JUNIOR, N. R. DE

Depto. de Física - Univ. Federal de São Carlos

O diagrama de fases do sistema Nb-Si indica a existência de um extenso campo bifásico: Nb + Nb₅Si₃, com uma faixa de composição de 0.6 a 37.5 %at de Si, permitindo obtenção de compósitos metal-intermetálico com uma grande flexibilidade na fração volumétrica entre as fases dútil e frágil. Resultados recentes indicam que a fase Nb e a fase intermetálica Nb₅Si₃ são termoquimicamente estáveis acima de 1500 C, e as composições mais adequadas para uso estrutural tem sido obtidos para composições contendo entre 6 e 18%at. de Si, além das composições eutéticas. Neste trabalho, foram escolhidas, composições hipoeutéticas, hipereutéticas, bem como a composição estequiométrica Nb₅Si₃, visando a obtenção de compostos com diferentes frações entre a fase intermetálica (Nb₅Si₃) e a fase dútil (Nb). As amostras inicialmente obtidas por fusão em forno a arco com eletrodo não consumível, em atmosfera inerte de argônio; foram refundidas. Esta refusão ocorreu em dois diferentes equipamentos; um por fusão por feixe de elétrons e outro por radiação infravermelho, através de lâmpadas de halogênio, em atmosfera protetora de argônio de alta pureza. A refusão das amostras foi feita através da técnica de fusão zonal. para provocar um refinamento da estru-

tura, resultante das diferentes solubilidades do soluto nos estados sólidos e líquidos. Durante a refusão variouse o numero de passes bem como as suas velocidades. As amostras obtidas foram caracterizadas por microscopia eletrônica de varredura, e microanálise quantitativa (EDS), avaliando-se a composição química das fases presentes bem como o nível de segregação obtido, comparando-se com as amostras obtidas por fusão por forno a arco. Os resultados são discutidos em função dos parâmetros utilizados para a fusão zonal para as diferentes composições.

Efeitos de Impurezas e Defeitos em Materiais (MAT) - 08/06/94

UMA EXPRESSÃO ANALÍTICA ENTRE A VARIAÇÃO DA FREQUÊNCIA COM A TEMPERATURA EM MEDIDAS DE ATRITO INTERNO

GRANDINI, C. R.; SCALVI, R. M. F.; SHUKLA, M. M.

UNESP - Bauru

A variação da frequência com a temperatura em medidas de atrito interno é um assunto que desperta grande interesse nos pesquisadores que trabalham na área, tanto teóricos como experimentais. WELLER et al [1] apresentaram uma expressão semi-analítica em 1981. Re-

centemente, GRANDINI et al [2] apresentaram uma expressão analítica que interpreta muito bem os resultados obtidos em amostras monocristalinas de nióbio contendo oxigênio. Este trabalho mostra o desenvolvimento de uma outra expressão bem geral em relação àquela apresentada anteriormente. Para verificar a aplicabilidade e a confiabilidade da expressão, foram utilizados resultados obtidos em amostras de nióbio e tântalo, puras e contendo oxigênio em solução sólida. Os resultados experimentais foram obtidos através de medidas de atrito interno como função da temperatura, utilizando a técnica do Pêndulo de Torção, num intervalo de temperatura compreendido entre 300 e 700 K. Os resultados mostram grande concordância entre a expressão analítica por nós desenvolvida e os dados experimentais, mostrando ser esta uma outra forma para se interpretar os resultados obtidos em medidas de atrito interno como função da temperatura. (Apoio: FUN-DUNESP, CNPq).

[1] - M. Weller et al - Acta Metall. et Mater., 29, 1047(1981).

[2] - C. R. Grandini, R. M. F. Scalvi and M. M. Shukla, 10th International Conference on Internal Friction and Ultrasonic Attenuation in Solids, Rome (Italy), 1993.

A TÉCNICA DO PÊNDULO DE TORÇÃO PARA A CARACTERIZAÇÃO MECÂNICA DE MATERIAIS

SCALVI, R. M. F.; GRANDINI, C. R.
UNESP - Bauru

Medidas de atrito interno tem sido muito utilizadas nos últimos trinta anos para o estudo de relaxações mecânicas em metais e suas ligas. A partir da década de oitenta, estas medidas vem sendo muito utilizadas para o estudo de novos materiais, como por exemplo materiais cerâmicos e polímeros. O princípio de medida do atrito interno é muito simples, a amostra é posta a vibrar em seu modo fundamental (vibrações livres ou forçadas), que causa a dissipação de energia sob a forma de calor, devido à existência de atrito interno. Essa dissipação de energia pode ser medida direta ou indiretamente. No caso do Pêndulo de Torção, esta dissipação de energia por ciclo é medida através do decremento logarítmico que é, a menos de uma constante, o próprio atrito interno da amostra. Nosso objetivo com este trabalho é mostrar algumas possibilidades de utilização desta técnica em materiais. Como ilustração, são apresentados resultados experimentais obtidos em amostras de metais de transição como nióbio e tântalo, puras e dopadas com intersticiais pesados como oxigênio e nitrogênio, além de medias em amostras de materiais cerâmicos e polímeros. (Apoio: FUN-DUNESP e CNPq).

FRENTE DE ENERGIA PROPAGANTE INDUZIDA POR IMPACTO IÔNICO E MIGRAÇÃO DE DEFEITOS PUNTUAIS EM METAIS

SILVA, C. R. S. DA; SCHERER, C.
Instituto de Física Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Cálculos de dinâmica molecular, utilizando potencial tipo "Embedded Atom Method", mostram claramente a emissão e propagação de uma frente de energia a partir de uma cascata de colisões iniciada por um impacto iônico de 2.5 keV. Tres sistemas foram considerados: -i) Rede perfeita de Cu; -ii) Rede de Cu contendo autointersticiais; -iii) Rede de Cu contendo intersticiais de Pt, sendo que os átomos intersticiais foram colocados inicialmente em posições distantes da cascata.

A cela de simulação foi dividida em cascas esféricas concêntricas e, a cada dez passos de integração, as energias potencial e cinética e o número de átomos intersticiais em cada casca foram monitorados. Este método permitiu verificar a existência e propagação da frente de energia e estabelecer a correlação entre a sua passagem e a migração dos átomos intersticiais, mesmo a considerável distância da região da cascata. Este fato indica que o fenômeno deve ser considerado como um possível novo mecanismo para Ion Beam Mixxing.

EVOLUÇÃO TÉRMICA DE NITRETOS DE FERRO PRODUZIDOS POR IMPLANTAÇÃO IÔNICA DE NITROGÊNIO EM MATRIZ DE Fe PURO PÓS-BOMBARDEADA COM ARGÔNIO.

FOERSTER, C. E.
UEPG, Ponta Grossa, PR
AMARAL, L.; BEHAR, M.
UFRGS, Porto Alegre, RS

Amostras de Fe puro (4 novas), são preparadas através de polimento mecânico de modo a se obter uma superfície plana e especular. Em seguida as mesmas são implantadas com Nitrogênio na concentração de 65 at.%, com um perfil de distribuição da superfície até aproximadamente 1200 Å. Neste etapa formam-se precipitados de ϵ -Fe₂N uniformemente distribuídos nesta região. E em seguida, estes são bombardeados com gás nobre Argônio a diversas fluências, de modo que haja uma sobreposição dos perfis de Nitrogênio

e de gás. A dissolução e reprecipitação dos nitratos é acompanhada nas diversas fases de tratamentos térmicos realizado em alto vácuo (10^{-5} Pa), durante uma hora em cada etapa, através das técnicas de: Espectroscopia Mössbauer (CEMS), Reação Nuclear $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$ e Difração de Raio-X. Os resultados mostram uma dependência na retenção dos nitratos em função da fluência de Ar, elevando a temperatura de retenção de 400 °C a 520 °C dos nitratos $\gamma\text{-Fe}_4\text{N}$. O mecanismo responsável pela retenção está associado à formação de complexos gás-vacância que retardam a difusão do nitrogênio até esta temperatura.

**DIFERENÇAS NO PROCESSO DE
RETENÇÃO DE CARBONITRETOS DE
FERRO EM AÇO "PRODUZIDO POR
IMPLANTAÇÃO IÔNICA DE C" EM
MATRIZ DE FERRO.**

FOERSTER, C. E.

UEPG, Ponta Grossa, PR

AMARAL, L.; BEHAR, M.

UFRGS, Porto Alegre, RS

Este trabalho divide-se em três etapas básicas. A primeira consiste na criação de um aço-carbono através da implantação iônica de carbono numa matriz de Fe puro (4 noves). Com isto se obteve um aço-carbono com 0,2 % do seu peso em carbono, uma região que vai da superfície até aproximadamente 1200 Å de profundidade. Na segunda fase, implanta-se nitrogênio simultaneamente nestas amostras (aços implantados com carbono) e no aço comercial AISI-1020. Finalmente, estes dois tipos de aços são bombardeados com gás nobre a diversas fluências mas no mesmo perfil da implantação anterior de nitrogênio. A dissolução e reprecipitação dos diversos carbonitretos formados em função dos tratamentos térmicos em alto vácuo (10^{-5} Pa), sempre durante recozimentos de uma hora são acompanhados através das técnicas de de: Espectroscopia Mössbauer (CEMS), Reação Nuclear $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$ e Difração de Raio-X. Com isto observa-se uma retenção de carbonitretos até temperaturas de 600 °C no aço formado por implantação de carbono, enquanto que o aço comercial AISI-1020, retém somente até 450 °C. Os mecanismos responsáveis são não somente a diferença de matrizes mas principalmente a presença do carbono em posições intersticiais mais bem definidas no aço produzido por implantação.

**THEORETICAL ANALYSIS FOR Ti
IN-DIFFUSION IN LiNbO_3 UNDER
APPLIED ELECTRIC FIELD**

SILVA, H. F. DA; NUNES, F. D.; MENDES FILHO, J.;
ANDRADE JÚNIOR, J. S.

U.F.C

Diffusion of Ti in LiNbO_3 have been extensively studied due to their use in manufacturing optical waveguides for different discrete devices, such as couplers, modulators, interferometers and others, as well integrated optics. Usually, researchers have used the traditional Fick's description for describing this kind of diffusion. Recent studies have shown that Ti in-diffusion might occur analogous to an ion-exchange process requiring a non-linear description [1-2]. Following ref. [1] a new description for Ti in-diffusion in LiNbO_3 was developed [3]. In this approach Ti diffuses via Li sites previously occupied by Nb ions, at least for concentrations up to 5.9%. Also, charge neutrality is required and diffusion will be dependent on the ratio r between Ti and Nb diffusivities. For $r \neq 1$ a non-linear diffusion equation is obtained for describing the diffusion process. In this work this new approach is applied to planar Ti in-diffusions in LiNbO_3 under the action of an applied electric field. The diffusion equation is non-linear and is solved using the orthogonal collocation method [4]. The diffusion profile of Ti concentration is calculated and is analysed how it can be modified under the influence of several parameters such as the ratio of diffusivities r , the diffusion time and the electric field intensity.

[1] - Phys. Lett. A , 169 (1992), 177.

[2] - J. Appl. Phys. , 60 (1986), 2343.

[3] - Dias Nunes - To be published in J. of Physics C - Condensed Matter

[4] - J. Villadsen - "Solution of Differential Equation Models by

*Preparação e Caracterização de Ligas
e Aços (MAT) - 08/06/94*

**ESTUDO DO SISTEMA NÍQUEL-COBALTO
SOB O PONTO DE VISTA DE DIFUSÃO
ATÔMICA**

BEATRICE, C. R. S.; CILENSE, M.

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

GARLLIP, W.

Departamento de Materiais - EESC - USP - São Carlos

Estudos realizados com o sistema Ni_3Co utilizando a técnica de medidas da resistividade elétrica, nos revelou a existência do fenômeno de ordem de curto alcance. Neste trabalho verificamos que o máximo de ordenação ocorre na temperatura de 465° C, apresentando dois trechos mais ou menos lineares, sendo um entre 300 e 465° C e outro no intervalo de 465 a 550° C. No presente trabalho, utilizando medidas de resistividade elétrica em função do tempo, a diferentes temperaturas de recozimento no intervalo de 300 a 465° C da liga temperada de 800° C, obtivemos a variação isotérmica

da resistividade elétrica em função do tempo, de cujas curvas, pelo método do corte a 50% da transformação a cada temperatura, nos forneceu a energia de ativação de difusão atômica na rede do sistema níquel-cobalto, sendo este valor da ordem de 2,0 eV. Agradecimentos: CNPq

COMPOSIÇÃO QUÍMICA E ESTABILIDADE TÉRMICA DE MATERIAIS COLETADOS EM REGIÕES DE ANOMALIA GEOMAGNÉTICA.

SILVA, J. K. L. DA

Universidade da Região da Campanha - URCAMP

SANTOS, C. A. DOS

Instituto de Física - UFRGS

MOREIRA, J. A. M.; MACEDO, J. W. DE P.

Departamento de Física - UFRN

Medidas aeromagnéticas têm sido, desde muito tempo, usadas em prospecção mineral. Via de regra, regiões de anomalia geomagnética são associadas a sítios geológicos ricos em ferro, titânio e outros metais pesados, sendo de grande interesse o estudo sistemático da correlação entre anomalia geomagnética e as propriedades físico-químicas dos minerais coletados na região anômala. Motivados pela existência de anomalias geomagnéticas na região do Seridó norterio-grandense, iniciamos um estudo sistemático, via difração de raios X, espectroscopia Mössbauer e magnetometria, com amostras coletadas no entorno dessas regiões. Mapas aeromagnéticos permitem uma definição de baixa precisão do contorno do corpo responsável pela anomalia. Com base nessa definição, coletamos amostras pertencentes ao corpo anômalo, e à região encaixante, na tentativa de descoberta de características físico-químicas correlacionadas com a anomalia geomagnética. Resumidamente, os resultados obtidos são os seguintes: (1) como era de se esperar, a concentração de magnetita, determinada via espectroscopia Mössbauer, correlaciona-se positivamente com a medida de susceptibilidade magnética; (2) o espectro Mössbauer do material pertencente ao corpo anômalo tem uma componente não observada no material da região encaixante; (3) esta componente, até o momento não identificada, desaparece após recozimento do material ao ar, durante 10 horas a 300 C; (4) outra característica do material pertencente ao corpo anômalo, é a inesperada estabilidade térmica da biotita presente. Ao contrário de outras amostras de biotitas, cuja oxidação do Fe_{2+} se dá por volta de 300 C, nas amostras aqui estudadas esta oxidação só ocorre após 500 C.

MEDIDAS DE ATRITO INTERNO E FREQUÊNCIA DE OSCILAÇÃO EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA EM AMOSTRAS DE MOLIBDÊNIO UTILIZANDO-SE UM PÊNDULO DE TORÇÃO

SCALVI, R. M. F.; GRANDINI, C. R.

Depto. Física-UNESP-Bauru

FLORÊNCIO, O.; TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.

Depto. Física-UFSCar-São Carlos

SILVA, J. R. G. DA

DEMA-UFSCar-São Carlos

A interação de gases como oxigênio e nitrogênio com metais de estrutura cúbica de corpo centrado como nióbio, vanádio e tântalo (grupo V) tem sido bastante estudada através de medidas de atrito interno. Estes metais são capazes de dissolver grandes quantidades de intersticiais pesados como oxigênio e nitrogênio, por exemplo, para formar soluções sólidas. Entretanto, o estudo do comportamento de átomos intersticiais do grupo VI, como o caso do molibdênio usando-se medidas de atrito interno não tem sido tão extensivo como para o grupo V. Neste trabalho apresentamos medidas de atrito interno como função da temperatura para amostras monocristalinas de molibdênio e também, medidas de frequência de oscilação em função da temperatura. Estas medidas foram obtidas utilizando-se um pêndulo de torção e os resultados de atrito interno foram analisados através do método das subtrações sucessivas e método do tempo de relaxação. As medidas de frequência de oscilação foram analisadas utilizando-se uma relação entre o quadrado da frequência e o inverso da temperatura. (Apoio:CAPES, FUNDUNESP e CNPQ).

INFLUÊNCIA DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS NAS MEDIDAS DE ATRITO INTERNO (EFEITO SNOEK) EM NIÓBIO E NIÓBIO-ZIRCÔNIO

FLORÊNCIO, O.; PEREIRA FILHO, M. DE S.;

QUEIROZ, J. R. DE O.; FREITAS, W. A. DE;

TEJIMA, H.; JORDÃO, J. A. R.; BOTTA FILHO, W.

J.; SILVA, J. R. G. DA

Universidade Federal de São Carlos

GRANDINI, C. R.; FERNANDES, R. M.

Universidade Estadual Paulista

FRANCISCO, R. H. P.; RODRIGUES, A. M. G. D.

Universidade de São Paulo

Átomos de soluto intersticial presentes em metais e ligas metálicas cúbicas de corpo centrado causam picos de relaxação mecânica, que são conhecidos como efeito

Snoek, e estudados através de medidas de atrito interno. Estas medidas em função da temperatura (no intervalo de 300K a 700K) estão sendo realizadas, num pêndulo de torção, em amostras de Nb e Nb-Zr (com 1,0a2,0% p. Zr) contendo diferentes teores de elementos intersticiais (Oxigênio e Nitrogênio). Os resultados encontrados para o Nb serão utilizados como referência para as ligas Nb-Zr, observando-se desta maneira o efeito do elemento substitucional nas medidas realizadas. Os espectros de múltiplas relaxações mecânicas obtidos para estas amostras são decompostos em picos elementares de Debye e associados a interações metal-intersticial (Nb-O, Nb-N, Zr-O, etc.). Simultaneamente são obtidos padrões de difração de Raios-X (método do pó) para informações sobre as estruturas cristalinas destes metais e as consequentes variações nos parâmetros de rede devido a presença de elementos intersticiais, podendo inclusive detectar mudanças devido a formação de outras fases. Apoio: CNPq, FTI-CEMAR, FAPESP.

INFLUÊNCIA DA NITRETAÇÃO IÔNICA POR PLASMA NA CINÉTICA DE PERMEAÇÃO DO HIDROGÊNIO EM AÇO.

ZAMPRONIO, M. A.; MIRANDA, P. E. V. DE;
TEODÓSIO, J. R.
PEMM - COPPE/UFRJ

A nitretação iônica por plasma é um processo termoquímico utilizado para melhorar as propriedades mecânicas e tribológicas de aços. Ela tem sido largamente utilizada para aumentar a dureza superficial, resistência ao desgaste e a vida em fadiga de componentes industriais. Este trabalho tem por objetivo: i) determinar o efeito da camada nitretada ionicamente por plasma, para três diferentes tempos de nitretação, sobre a cinética de permeação do hidrogênio em aço; ii) medidas de tensão residual na camada nitretada. O substrato utilizado foi o aço baixa liga e alta resistência mecânica do tipo API 5L X-65 composto de uma matriz ferrítica contendo perlita bandeada. Os teste de permeação do hidrogênio foram feitos a 50°C em solução NaOH 0,1N usando uma célula eletroquímica de dois compartimentos. A composição química da camada nitretada e a tensão residual introduzida neste tratamento foram determinados utilizando a técnica de difração de raio X. Os resultados obtidos mostram que, dependendo da espessura da camada nitretada, a cinética de permeação do hidrogênio pode aumentar ou diminuir quando comparado com a do substrato. Isto esta de acordo com resultados obtidos em trabalhos publicados recentemente.

FABRICAÇÃO DE LIGAS SEMICONDUTORAS ATRAVÉS DE "MECHANICAL ALLOYING".

AN, C. Y.; FRANZAN, A. H.

LAS/INPE

SILVA, C. R. M. DA
AMR/IAE/CTA

Mechanical alloying (MA) é uma técnica de obtenção de ligas através de um moinho planetário, onde o material é submetido à sucessivos impactos de compressão com esferas de alta dureza. A energia destas esferas é proveniente das vibrações simultâneas do moinho em tres direções perpendiculares. Esta técnica é apropriada para preparação de ligas onde os elementos constituintes apresentam uma grande diferença no ponto de fusão, e a formação da liga ocorre em temperaturas próximas á do meio ambiente através de interdifusão isotérmica na fase sólida. Deste modo, o MA é um processo mais simples e de baixo custo se comparado com os métodos tradicionais de fusão e lingotamento, onde por exemplo, a temperatura necessária para a preparação das ligas de $Si_{1-x}Ge_x$ chega em torno de 1500°C. A formação da solução sólida $Si_{0.80}Ge_{0.20}$ foi acompanhada em etapas através de difração de Raio-X. e verifica-se que para uma carga de 5,6 gramas são necessários aproximadamente 24 horas de moagem através de MA, usando-se uma relação entre os pesos das esferas e da carga de 5:1.

USO DE ULTRASSOM PARA AVALIAÇÃO DE MICRODEFEITOS POR HIDROGÊNIO EM AÇOS

KRÜGER, S. E.
PEMM/COPPE/UFRJ
CAMARGO, P. C. DE
Departamento de Física/UFPR

A possibilidade de detecção e caracterização de microbolhas por hidrogênio é investigada com o uso de ultrassom. Os parâmetros pesquisados foram a mudança na velocidade do som, a atenuação e o espectro dos pulsos de RF. Um aço 5Cr1/2Mo foi hidrogenado eletroquimicamente com o monitoramento por ultra-som simultâneo em uma célula construída especialmente para este fim. A velocidade é medida pelo método da superposição dos pulsos de RF. A atenuação é avaliada com o auxílio de um gerador de curva de decaimento exponencial. Na análise espectral é avaliada a mudança no domínio da frequência entre o pulso original e os ecos. Após a hidrogenação o material foi caracterizado metalograficamente mostrando que houve formação de microbolhas (da ordem de 30µm) próximas a superfície do material (profundidade de até 100 µm). Nos parâmetros avaliados com o ultra-som verificou-se um aumento significativo na atenuação, e uma mudança na forma dos pulsos a ser avaliada no domínio da frequência. Não se detectou alterações na velocidade. O sistema permite medir variações de até 0,1%.

**CINÉTICA DE NUCLEAÇÃO E
CRESCIMENTO DE DANOS INDUZIDOS
PELO HIDROGÊNIO EM JUNTAS
SOLDADAS DE AÇO INOXIDÁVEL
AUSTENÍTICO**

GIMENES, J. A. S.

UFPR

KUROMOTO, N. K.; NICOLÓ, I. DE

Departamento de Física/UFPR

A crescente utilização de juntas soldadas confeccionadas em aços inoxidáveis austeníticos (AIA) para trabalhar em ambientes onde o hidrogênio (H), puro ou associado a outros elementos, está presente, mantém um estudo contínuo sobre o fenômeno de fragilização pelo H desses materiais. O objetivo deste trabalho é observar a cinética de nucleação e crescimento de danos superficiais introduzidos durante a hidrogenação e a desgaseificação nestas juntas. Utilizaram-se chapas de AIA de várias espessuras tipo ABNT 304L, soldadas pelos processos TIG e MIG, e como metal de adição o aço ABNT 308L. A hidrogenação foi realizada catódicamente à temperatura ambiente, utilizando como eletrólito uma solução de H_2SO_4 1 N. As análises das amostras foram realizadas para diferentes tempos de desgaseificação, isto é, 3 minutos após o fim da hidrogenação, 30 minutos, 1 hora, 2 horas, e após 24 horas, num total de 4 dias. Observações realizadas até o momento, através da técnica de microscopia ótica mostraram que a ferrita δ , fase presente na região da solda, atua como um agente inibidor à propagação das trincas. Estas parecem nuclear na austenita e se propagam até encontrar a fase δ resultando em trincas menores, em maior densidade e com morfologia mais uniforme que as nucleadas no material de base. Como complementação, estão sendo realizadas análises das amostras utilizando a técnica de difratometria de Raios-X para verificação de nucleação de novas fases induzidas pela hidrogenação-desgaseificação, tais como as fases martensíticas induzidas no metal de base.

**CARACTERIZAÇÃO MULTIFRACTAL DE
PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO
DIRETAMENTE REDUZIDAS.**

COSTA, J. A. T. B. DA; JAVORSKY, C. S.; SILVA,
A. M. M. DA; DOTTO, M. E. R.

UFSC

VILELA, A. C. F.; SOARES, T. T.

PPGEMM-UFRRS

MORS, P. M.

IF-UFRRS

O processo de redução do minério de ferro em presença de carvão, ocorrendo diretamente no estado sólido (via intermediários gasosos como o CO e/ou H_2), é conhecido como *redução direta*. O produto da redução direta do minério de ferro é conhecido como *ferro-esponja*,

cujos nome indica a sua natureza porosa. Industrialmente, o minério a ser reduzido é preparado na forma de pelotas sinterizadas, as quais apresentam uma porosidade inicial. O crescimento dos poros durante a redução resulta da remoção dos átomos de oxigênio na superfície livre do sólido e da movimentação das vacâncias deixadas na estrutura do mesmo. A cinética de redução está, portanto, intimamente relacionada à cinética de crescimento da estrutura porosa. A fim de contribuir para o estudo dos mecanismos de redução direta, procedemos a caracterização multifractal da estrutura do ferro-esponja obtido a partir de pelotas hematíticas reduzidas sob diferentes condições. As medidas foram feitas pelo procedimento de box-counting a partir de fotomicrografias digitalizadas de cortes dessas pelotas, as quais apresentam grande contraste entre a superfície metálica e os poros. Os softwares de análise das imagens desenvolvidos para esse fim podem ser prontamente empregados em outras aplicações.

**DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA DE
SOLUBILIZAÇÃO DE CARBONETOS DE
VANÁDIO EM UM AÇO MICROLIGADO
AO VANÁDIO**

SOUZA, R. C. DE; LOURENÇO, N. J.; BALANCIN, O.

UFSCar

O conhecimento da evolução do crescimento de grão austenítico é de extrema importância para o controle do processamento e propriedades dos aços microligados. A cinética de crescimento destes grãos é fortemente afetada pela presença de carbonetos ou carbonitretos de vanádio. O objetivo deste trabalho é determinar a temperatura de início de solubilidade de carbonetos de vanádio em um aço médio carbono. A microestrutura de dezesseis amostras deste material foram observadas após passarem por tratamentos térmicos: têmpera e revenido. A têmpera das amostras foi feita em um intervalo de temperatura de 919 a 1244gC sempre para um mesmo tempo de 15 min, neste processo, a liga é aquecida para que ocorra a transformação da ferrita em austenita e em seguida resfriada rapidamente para se congelar a estrutura. Após os tratamentos térmicos, as amostras foram atacadas com uma solução a base de ácido pícrico. A observação dos grãos foi feita através de microscopia ótica. A variação do tamanho de grão com a temperatura, obtida das experiências descritas acima, revela uma mudança acentuada na taxa de crescimento de grão na temperatura de 1120gC. Este ponto separa de modo bem definido duas regiões de crescimento de grão. A primeira, de 919 a 1120gC, cuja taxa de crescimento é baixa, indica a presença de precipitados bloqueando os contornos de grão. A segunda região, de 1120 a 1244gC, tem uma taxa de crescimento de grão grande quando comparada à primeira região, indicando a dissolução destes precipitados. Pode-se concluir então, que a presença de precipitados ancoram o contorno de

grão, diminuindo a área superficial. A temperatura de 1120°C é a temperatura de início de solubilização de carbonetos.

IRON-CHROMIUM EAM POTENTIALS OBTAINED FROM DISORDERED ALLOY DATA

SCHÖN, C. G.; LIMA, M. S. F.

*Departamento de Eng. Metalúrgica e de Materiais da
Escola Politécnica da USP*

The Embedded Atom Method (EAM) proved to be a powerful semi-empirical tool for atomistic simulation of crystal lattice defects in metals and alloys. Until recently, the studied systems were limited to the few that present phases with well-characterized physical properties, such is the case of pure transition metals and binary alloys with strong ordering tendency (for example, Fe-Ni and Ni-Al systems). Only now, attempts are made to derive the necessary potentials and embedding functions for disordered alloys. The purpose of this work is to compare two independent derivations (Farkas, D. et alii, to appear in *Acta Met.* and Grujicic, M. et alii, *Caphad* 17, p. 383, 1993) of the Fe, Cr and mixed Fe-Cr potentials in which the same set of data (solution enthalpies, lattice parameter variation, etc.) is employed. It is shown that although the physical interpretation of the potentials is different in the two approaches, the obtained results are very similar. The derivation of the potential from room temperature data is criticized for pure chromium due to the antiferromagnetic transition at 312.7 K. It is proposed that the magnetic part of the potential should be explicitly included in the derivation from the potentials of the first period transition metals.

MODELAGEM MATEMÁTICA DA CORROSÃO POR FRESTA DO TITÂNIO EM SOLUÇÕES CLORETADAS

PARIONA*, M. M.

Dpto de Eng. de Materiais, Univ. Federal de São Carlos

MÜLLER, I. L.

Dpto de Engenharia Metalúrgica e dos Materiais, Univ.

Federal Rio Grande do Sul

Apresenta-se uma simulação da corrosão por fresta do titânio em cloreto de sódio baseada nas equações de conservação de massa (1) e (2),

$$N_i = -D_i \Delta C_i - \frac{z_i D_i F C_i}{RT \Delta \phi};$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\Delta N_i + R_i$$

dada por Sharland [1] e em dados experimentais, obtidos por Pariona [2]. A simulação foi realizada variando os parâmetros: gap, profundidade da fresta e potencial

de corrosão. Esta simulação prevê as variações das concentrações dos íons, da queda de potencial na fresta, da densidade de corrente de corrosão e do potencial dentro da fresta em função da profundidade. Encontra-se para gaps mais apertados, para potencial de corrosão mais elevados e para maiores profundidades da fresta, maiores variações: das concentrações dos íons, da queda potencial na fresta, da densidade de corrente de corrosão (i_{corr}) e do potencial no fundo da fresta em função da profundidade ou do pH. A queda ôhmica finalmente controla o mecanismo da corrosão por fresta. A i_{corr} para o modelo em uma dimensão aumenta com a profundidade enquanto em duas dimensões a i_{corr} diminui com a profundidade.

[1] Sharland, S.M. A mathematical model of the initiation of crevice corrosion in metals. *Corrosion*, v.33, p.183-201, 1992.

[2] Pariona, M.M. Corrosão por fresta do titânio em cloreto de sódio a temperaturas intermediárias, PhD tese, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e dos Materiais, Univ. Federal Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1993.

* Atualmente, pós-doutorado no Dpto de Eng. de Materiais, Univ. Federal de São Carlos/SP

ANÁLISE MICROESTRUTURAL DO METEORITO YAMATO 791694

BRUNO, J. C.; FERNANDES, A. A. R.

IME

SCORZELLI, R. B.

CBPF

O estudo metalográfico dos meteoritos é de grande interesse científico, já que, além de fornecer informações a respeito da origem do sistema solar, oferece a oportunidade de investigar as propriedades de ligas metálicas que se formaram em condições de pressão e temperatura difíceis de reproduzir em laboratório. No presente trabalho, foram analisadas por microscopia ótica e eletrônica amostras do meteorito Yamato 791694, um ataxito rico em níquel encontrado na Antártica em 1979. Amostras do meteorito foram polidas e atacadas com Nital 2%. A observação das amostras antes do ataque químico revelou a existência de uma fase grosseira, que apresentava pequeno contraste com a fase principal. Fazendo-se metalografia quantitativa, estimou-se a fração volumétrica desta fase em 3,6%. O ataque com Nital revelou a presença de duas fases adicionais nos contornos de grão da fase grosseira. A análise por dispersão de raios-X revelou que a composição da fase grosseira é aproximadamente $Fe_{41}Ni_{46,5}P_{12,5}$, o que sugere tratar-se do mineral schreibersita. Uma das fases reveladas nos contornos contém cerca de 19,5% Al, 43,5% Fe e 30% Ni, além de P ou Si. A outra fase em baixo relevo é pobre em Ni, com teores entre 6,3% e 13,5% na matriz de ferro, sendo compatível com a fase kamacita. O ataque químico revelou também a existência na fase princi-

pal de regiões com linhas de Neuman e outras contendo partículas finas, possivelmente Fe_3Ni . As regiões com linhas de Neuman contêm cerca de 36,5% Ni e 63,5% Fe, o que sugere tratar-se de taenita. A análise metalográfica realizada neste trabalho mostrou que este meteorito é um material multifásico com predominância de taenita, concordando com resultados previamente obtidos por espectroscopia Mössbauer(1). A conjunção das técnicas de microscopia ótica e eletrônica é imprescindível para a descrição completa da microestrutura destes materiais.

(1) R. B. Scorzelli, R. A. Pereira, C. A. C. Perez e A. A. R. Fernandes, Proc. 18th Symp. on Antarctic Meteorites(a ser publicado).

ESTUDO COMPARATIVO ENTRE AÇOS INOXIDÁVEIS DUPLEX PRODUZIDOS DE PÓ E DE SIMPLES MISTURA.

LIMA, W. M.

Departamento de Física. Universidade Estadual de Maringá-PR (Brasil)

TORRALBA, J. M.; CAMBRONERO, L. E. G.; RUIZ-PRIETO, J. M.

Escola de Minas - Universidade Politécnica de Madrid. Rios Rosas, 21.E - 28003 Madrid (Espanha)

Vários tipos de aços inoxidáveis são comparados sob o ponto de vista de seus comportamentos mecânicos e de corrosão. Estes aços inoxidáveis são conhecidos como duplex e possuem as mesmas composições, mas obtidos por dois métodos diferentes. O primeiro método utiliza pós de aço inoxidável pré-ligados e o segundo uma simples mistura de pó ferrítico e austenítico. O comportamento mecânico destes materiais foi estudado levantando as seguintes propriedades: densidade (método de Arquimedes), dureza (usando escala Rockwell A), resistência a tração, alongamento e variação dimensional, enquanto que na corrosão utilizamos duas soluções ácidas, sendo que a primeira contém 1% de ácido clorídrico e a segunda 10% de ácido sulfúrico.

INTERFERENCE HEAT EFFECT IN HARDENING PRODUCED BY TWO LASER SOURCES

COSTA, A. R. DA; SOUZA, A. L. DE; MELO, E. G.; KOKSHENEV, V. B.

Universidade Federal de Ouro Preto

A new theoretical study of heat effect in the laser transformation hardening problem is suggested. Analytical heat flow equations have been analyzed for the case of idealized heat sources in the framework of one-dimensional transient model for a flat semi-infinite body. The simplest assumptions, in particular, the absence of heat losses and constant thermal properties have been adopted. By means of generalization of Green function

method for the thermal distribution of unit point source, the temperature profile between two laser sources has been derived. It is shown that the interference of two temperature fields leads as well to enhancing as to attenuation of the temperature profiles which strongly depends on the distance between the power sources. This in turn gives rise to the reach picture of the hardness zone profile. Our predictions of temperature distribution for the case of two laser sources can be applied for the real heat treatment to improve the hardness of steel tools. Financial support: FAPEMIG, CNPq

Preparação e Caracterização de Materiais de Interesse Tecnológico (MAT) - 09/06/94

ESTUDOS DE SINTERIZAÇÃO ATIVADA EM NIÓBIO E TÂNTALO

GOMES, U. U.; FREIRE, J.; FIGUEIRA, M.
UFRN

O estudo da Sinterização ativada dos metais refratários (Nb, Ta, W e Mo) tem grande importância tanto científica, dado a busca pelo entendimento da física básica da sinterização ativada, como técnico-econômico pelo significado estratégico dos metais refratários. A adição de ativadores (metais de transição atuam no sentido de aumentar o efeito da sinterização, funcionando como um "curto-circuito" no caminho de difusão, favorecendo o rápido transporte de matéria por difusão para a região de contato inter-partículas, a uma determinada temperatura, resultando num maior processo de densificação, propriedades mecânicas e físicas mais adequadas. O presente trabalho desenvolve um estudo de sinterização ativada com Nióbio e Tântalo dopados com alguns metais de transição (Ni, Fe, Pd). Os resultados são analisados em função do percentual de aditivos, da variação do tempo e da temperatura de sinterização (900-1900 C) microdureza, análise microestrutural e densificação.

ESTUDO SISTEMÁTICO, VIA DIFRAÇÃO DE RAIOS X E ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER, DE AMOSTRAS NATURAIS DAS SÉRIES TANTALITA COLUMBITA E TAPIOLITA - MOSSITA.

ZAWISLAK, L. I.; CUNHA, J. B. M. DA; SANTOS, C. A. DOS

Instituto de Física - UFRGS

Os minérios popularmente conhecidos como tantalita e columbita são as principais fontes, respectivamente, de tântalo e de nióbio. Apresentando composição química

do tipo $(Fe, M)(Ta, Nb)_2O_6$, onde M representa vários metais de transição, sendo Mn o mais comum, esses minérios constituem, na verdade, duas séries cristalográficas: uma ortorrômbica, e outra tetragonal, sendo que com a primeira estrutura surgem os minérios mais ricos em nióbio, e com a segunda aqueles ricos em tântalo. Ainda há controvérsia na literatura mineralógica sobre os limites de solubilidade dessas duas estruturas. Há quem suponha existir duas soluções sólidas contínuas; a solução ortorrômbica teria como elementos extremos a tantalita e a columbita, enquanto a tapiolita e a mossita seriam os elementos terminais da solução tetragonal. O problema é que jamais foram descobertos os minérios $FeTa_2O_6$ com estrutura ortorrômbica (tantalita), nem $FeNb_2O_6$ com estrutura tetragonal (mossita). Significa dizer que, em geral, os minérios popularmente conhecidos como tantalita são, na presente classificação, tapiolita. Ao lado dessa questão do limite de solubilidade, este sistema apresenta interessantes propriedades magnéticas, ainda não totalmente exploradas. Por exemplo, no composto tetragonal $FeTa_2O_6$ a sub-rede dos átomos de Fe apresenta estrutura similar àquela dos átomos de Ni no composto K_2NiF_4 , o clássico antiferromagneto bidimensional. Além disso, o eixo cristalográfico c é mais do que o dobro do eixo a. Esses dois fatos têm motivado alguns pesquisadores a investigarem a existência de comportamento bidimensional também nesse composto. Medidas Mössbauer recentemente realizadas no IF-UFRGS, em amostras sintéticas, suportam a hipótese de um comportamento de baixa dimensionalidade. Na presente comunicação apresenta-se um estudo sistemático com 20 amostras naturais, objetivando a investigação do limite de solubilidade, e do efeito dos metais de transição M, sobre o ordenamento magnético a baixa temperatura. Nenhuma amostra rica em nióbio apresentou estrutura tetragonal; tampouco foi observada amostra rica em tântalo com estrutura ortorrômbica, suportando a hipótese da inexistência dos minerais tantalita e mossita. Medidas Mössbauer à temperatura de 4.2 K sugerem que a presença dos metais de transição M (Mn, Mg, Ti) reduz consideravelmente a temperatura de ordenamento ferromagnético, de 8.5 K (amostra sintética $FeTa_2O_6$) para algum valor inferior à temperatura de hélio líquido.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES A BASE DE METAIS DE TRANSIÇÃO (Co, Fe) PARA A REAÇÃO DE REDUÇÃO DE OXIGÊNIO. INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO E DE FENÔMENOS DE COMPLEXAÇÃO NAS PROPRIEDADES CATALÍTICAS.

ALVES, M. DO C. M.

LNLS - Caixa Postal 6192 Campinas

TOURILLON, G.

LURE - Bâtiment 209 D Orsay Cedex França

O presente trabalho é dedicado ao estudo da influência do tratamento térmico nas propriedades catalíticas de catalisadores a base de Co e de Fe ativos para a reação de redução de oxigênio. Utilizando diferentes técnicas como a voltametria cíclica e a espectroscopia de absorção de raios X nas bordas K Co, Fe, N, O, C e a MET (Microscopia Eletrônica em Transmissão) foi possível de determinar precisamente a natureza química dos sítios catalíticos. Foram estudados como catalisadores os seguintes sistemas: ftalocianinas de Co e de Fe adsorvidas sobre carvão ativo e os sistemas compostos pela mistura de poliácrlonitrila e acetato de Co ou de Fe adsorvidos sobre carvão ativo. Os sistemas a base de ftalocianina de Co/carvão ativo e poliácrlonitrila+acetato de Co/carvão ativo apresentaram um máximo de atividade após o tratamento térmico o que está diretamente relacionado a formação de agregados metálicos de pequeno tamanho ($\approx 20 \text{ \AA}$). O aumento do tamanho destes agregados (T superior a 900 °C) provoca a diminuição da atividade catalítica. O tratamento térmico dos catalisadores a base de ftalocianina de Fe e da mistura poliácrlonitrila+acetato de Fe sofreram diminuição da atividade catalítica após o tratamento térmico. Esta diminuição da atividade é associada a formação de carbeto de ferro. A segunda parte deste trabalho foi dedicada ao estudo do papel desempenhado pelo nitrogênio neste tipo de catalisadores. No caso dos catalisadores constituídos pela mistura poliácrlonitrila e acetato de Co, o poliácrlonitrila foi substituído por diferentes polímeros sem nitrogênio. Foi então demonstrado que processos de complexação ocorrem durante a síntese destes catalisadores sendo os mesmos responsáveis pela alta atividade catalítica após o tratamento térmico.

The Relation of the Rotation Force Constant of Interatomic Bond to Toughening of Silicon Crystal with Diamond Structure

WANG, C.; BOTTA FILHO, W. J.; PANDOLFELLI, V. C.

UFSCar

Considering the interaction of atoms in a silicon crystal with diamond structure as interatomic potential described by Morse's function, this work addresses the possibility of toughening the crystal by decreasing the rotation force constant and increasing the stretch force constant of an interatomic bond. Theoretical analysis bases on the consideration that the reduction of bond rotation force constant results in the contraction of real fracture surface which is contributed to the increment of surface energy of the crystal. The calculation shows that toughening may reach to 550% for diamond crystal and 285% for silicon crystal if the bond rotation force constants both for those two crystal are decreased to one half. This work not only provides a new

method for toughening brittle crystals but also brings a new idea into the design of materials with high strength and good toughness. Reducing elastic shear modulus and increasing elastic bulk modulus of a material is also suggested as the design principle of toughening the material after the relation of bond rotation and bond stretch force constants with elastic shear modulus and elastic bulk modulus was discussed.

SOL-GEL FILMS: OPTICAL CHARACTERIZATION OF THE SPIN COATING PROCESS.

HOROWITZ, F.

Instituto de Física - UFRGS

DAWNAY, E.; FARDAD, M.; YEATMAN, E.

Optical and Semiconductor Devices Section, Imperial College of Science, Technology and Medicine

The underlying physics of spin coating, a widely used technique in the semiconductor industry, still presents challenges that are mostly due to the lack of experimental data on changing parameters during the process. This study aims at bridging this gap by the interferometric monitoring of a sol-gel film on a rotating Si wafer in real time. Measurements were performed in a range of initial sol compositions (varying silicitanian alkoxide/solvent ratios and catalyst concentration), aging and speeds of rotation (700–3000 rpm). Reflectances were recorded every 0.01 s for 10–60 s spin-off periods, and curves of optical thickness variation versus time were extracted from the modulated reflectance data. From the inflections in the curves, the stages following intense convective mass flow were identified as: convection-evaporation, evaporation and limited-evaporation. Comparison with published theoretical models is considered, including the possible presence of a “solid skin” and determination of kinematic viscosities in the range 3–30 cS.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE SONOGÉIS DE SÍLICA DOPADOS COM NANOCRISTAIS DE CdSe

HUMMEL, D. C. A.

DEMA-FEM, UNICAMP

TORRIANI, I. L.

IFGW, UNICAMP

CRAIEVICH, A.

LNLS/CNPq e IFUSP

DE LA ROSA-FOX, N.; ESQUIVIAS, L.

Universidade de Cadiz, Espanha

RAMOS, A. Y.

IFGW, UNICAMP e LMCP-CNRS, França

Os materiais compósitos com partículas nanocristalinas semicondutoras imersas em matrizes vítreas transparentes têm despertado grande interesse devido ao seu potencial para aplicações em óptica não linear. A obtenção destes materiais pela via sol-gel apresenta vantagens por não necessitar de altas temperaturas e permitir o crescimento de nanopartículas com uma distribuição de tamanhos bastante estreita. Neste trabalho apresentamos resultados de preparação de xerogéis de sílica dopados com CdSe obtidos pelo uso da sonoquímica. As matrizes hospedeiras (sonogéis) foram preparadas pela hidrólise de TEOS com adição de nitrato de cádmio e formamida ou N-N-dimetilformamida como agente químico de secagem. Os sonogéis foram secados a 40°C. A impregnação dos sonogéis secos com solução de KSeCN sob vácuo promove a formação de nanocristais de CdSe “in situ”. Os xerogéis vermelhos e transparentes obtidos foram caracterizados por espectroscopia de UV e TEM. As microestruturas da matriz e do material dopado foram analisadas por SAXS. O número e tamanho dos nanocristais dependem das características estruturais da matriz hospedeira e também das condições envolvidas no processo de impregnação. RHAÉ-CNPq, CNPq.

CdS NANOCRISTAIS EMBEDDED IN SILICA SONOGEL

CRAIEVICH, A.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq, Campinas, SP e Instituto de Física/USP, São Paulo, SP

ROSA-FOX, N. DE L.; BLANCO, E.; PIÑERO, M.;

RAMIREZ-DEL-SOLAR, M.; ESQUIVIAS, L.

Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, Cádiz, Espanha

Foram preparadas amostras de géis de sílica molíticas utilizando-se sonocatalyse e adição de formamida. Os géis foram utilizados como matrizes para a obtenção de compósitos sílica gel-semiconductor. Foram precipitados nanocristais de CdS expondo os géis porosos a um fluxo de H₂S. Experimentos de microscopia eletrônica por transmissão (TEM) e de absorção de raios-X (XANES, borda K do Cd) demonstraram a existência de cristais de CdO como consequência da sulfuração incompleta. Os tamanhos dos cristais (2-6nm) foram determinados mediante a técnica de espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS). Os espectros de absorção ótica confirmaram o efeito de confinamento quântico associado aos nanocristais de CdS.

ANÁLISE POR SAXS DA CINÉTICA DE CRESCIMENTO DE POROS DURANTE A SINTERIZAÇÃO DE XEROGÉIS DE SnO_2
CRAIEVICH, A.

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq, Campinas, SP e IFUSP, São Paulo, SP

SANTILLI, C. V.; PULCINELLI, S. H.

Instituto de Química/UNESP, Araraquara, SP

Os estudos da evolução estrutural de sistemas bifásicos são de importância para o entendimento de vários processos físicos, incluindo separação de fases em vidros, em ligas metálicas e a evolução da porosidade e de grãos em materiais cerâmicos. Trabalhos experimentais e teóricos sugerem que em certos casos a evolução da função de estrutura, em condições isotérmicas, apresenta propriedade de "dynamical scaling". Esta propriedade foi demonstrada para ligas e sólidos amorfo binários. Esta comunicação apresenta um estudo da evolução estrutural de xerogéis porosos de SnO_2 durante o tratamento isotérmico a 200, 300, 400, 500 e 600°C, mediante medidas de SAXS (Small Angle X-Ray Scattering) "in situ". As amostras foram preparadas pelo processo sol-gel e os dados de SAXS obtidos usando radiação síncrotron (DCI/LURE/França). Para temperaturas elevadas e tempos de tratamento longos, os resultados experimentais mostram que o comportamento cinético da função de estrutura é concorde com as previsões teóricas de "dynamical scaling". Nestas condições experimentais a dependência temporal do parâmetro estrutural que caracteriza o tamanho médio dos poros obedece uma lei de potência, com valor de expoente característico do mecanismo de coagulação. Apoio: (FAPESP, CNPq)

Preparação e Caracterização de Ligas Metálicas (MAT) - 09/06/94

ORDEM LOCAL EM TORNO DOS ÁTOMOS DE FERRO NA LIGA METÁLICA $\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$ POR ABSORÇÃO DE RAIOS-X.

SANTOS, D. R.; TORRIANI, I. L.

IFGW, UNICAMP

RAMOS, A. Y.

IFGW, UNICAMP e LMCP-CNRS, França

KNOBEL, M.

IENGF, Itália

Ligas metálicas $\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$ tratadas termicamente apresentam excelentes propriedades magnéticas atribuídas à presença de cristais nanométricos de $\text{Fe}(\text{Si})^{a,b}$. Grãos cristalinos de dimensões entre 10 e 12 nm são crescidos a partir

da liga amorfa por tratamentos a temperaturas da ordem de 540°C e tempos entre 20 e 60 minutos^c. Neste trabalho estudamos o ordenamento a curto alcance por absorção de raios-x na borda K do ferro para amostras no estado inicial amorfo e amostras tratadas a 540°C por 20, 40 e 60 minutos. A mudança de estrutura local entre a amostra sem tratamento térmico e as amostras tratadas é drástica. No espectro EXAFS da amostra não tratada é possível evidenciar a presença de vizinhos silício em proporção significativa em torno dos átomos de ferro. Por outro lado, os espectros EXAFS e XANES das três amostras tratadas parecem idênticos, indicando uma identidade da estrutura a curto e médio alcance a partir de 20 minutos de tratamento. Estes espectros são semelhantes ao espectro do ferro-bcc puro. As pequenas diferenças observadas não podem ser atribuídas sem ambiguidade à contribuição de vizinhos de natureza diferente, de tal modo que não foi possível evidenciar uma presença significativa de silício na rede dos nanocristais. A análise quantitativa dos dados, em andamento, deve permitir definir a estrutura local no estado amorfo e os desvios da estrutura nos nanocristais com relação à estrutura do ferro-bcc puro. CNPq, RHA-E-CNPq.

^aY. Yoshizawa, S. Oguma, K. Yamauchi
J. Appl. Phys., 64, 6044 (1988).

^bG. Herzer - IEEE Trans. Mag.,
26, 1397 (1990).

^cM. Knobel, D. R dos Santos, I. L. Torriani,
R. S. Turtelli, Nanostruc. Materials, 2, 399 (1993).

CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO MICROESTRUTURAL E TERMADINÂMICO DE LIGAS COM MEMÓRIA DE FORMA $\text{Cu} - \text{Zn} - \text{Al}$ e $\text{Cu} - \text{Al} - \text{Ni}$ OBTIDAS POR SOLIDIFICAÇÃO RÁPIDA.

ARAÚJO, C. J. DE

DEM/CCT-UFPB

MELO, T. A. DE A.

Departamento de Tecnologia Mecânica-CT-UFPB

Foram obtidas experimentalmente uma série de dados microestruturais e termodinâmicos, na ausência de carregamento externo, para fitas de ligas com memória de forma $\text{Cu} - \text{Zn} - \text{Al}$ e $\text{Cu} - \text{Al} - \text{Ni}$ que foram fabricadas via solidificação rápida utilizando a técnica de melt-spinning. Utilizou-se também para caracterização as técnicas de difração por raio-x e análise térmica diferencial (ATD). Os resultados catalogados revelam tipo martensita, parâmetros de rede, Temperaturas de transformação de fase, variação de entalpia e entropia associada a transformação e a influência de alguns tratamentos térmicos sobre a transformação reversa (martensita a austenita). Trabalho parcialmente financiado pelo CNPQ e CAPES.

**CARACTERIZAÇÃO E ESTUDO DE
PROPRIEDADES MECÂNICAS DE LIGAS
 $Al - Fe - V - Si$ e $Al - Fe - Nb - Si$,
PREPARADAS POR "MELT-SPINNING".**

MELO, T. A. DE A.; LIMA, S. J. G. DE
Departamento de Tecnologia Mecânica-CT-UFPB

LEITE, J. P.
DEM/CCT-UFPB
MONTEIRO, W. A.
USP/IPEN

Ligas de $Al - Fe - V - Si$ e $Al - Fe - Nb - Si$, foram preparadas em forma de fitas por "Melt-Spinning" e caracterizadas por difração de raio-x, microscopia ótica e eletrônica. As ligas brutas apresentam estruturas idênticas compostas de finos precipitados $Al_{13}(Fe, Nb)_3Si$ ou $Al_{13}(Fe, V)_3Si$, distribuídos de maneira homogênea sobre a matriz de alumínio. Verificou-se, também, a influência de tratamentos térmicos sobre a estabilidade das ligas, concluindo-se que a liga $Al - 6,2Fe - 1,0Nb - 2Si$ (%at), com melhores características, só apresentou alterações na estrutura com consequente danos as propriedades mecânicas após tratamento térmico a $500^{\circ}/100$ horas. Essa degradação das propriedades mecânicas foi acompanhada pelo coalescimento dos precipitados e formação do composto $Al_{13}(Fe, Nb)_4$ em forma de plaquetas.

**A TÉCNICA DE ELABORAÇÃO
MECÂNICA DE LIGAS PARA A
OBTENÇÃO DE COMPOSTOS
INTERMETÁLICOS**

OLIVEIRA JR, N. R. DE; BOTTA FILHO, W. J.
UFSCar

Os compostos intermetálicos são materiais que apresentam estruturas cristalinas ordenadas, com fortes ligações entre átomos de diferentes espécies, e consequentemente, elevado ponto de fusão. Suas propriedades nobres em altas temperaturas, tais como, elevada resistência mecânica, capacidade de reter esta resistência dentro de uma ampla faixa de temperatura e alto módulo de elasticidade, tem despertado interesse associado a aplicações estruturais em altas temperaturas. Uma desvantagem associada à produção de alguns compostos intermetálicos é a elevada temperatura de fusão, que dificulta a produção desta classe de compostos via processos de fusão convencional. O processo de Elaboração Mecânica de Ligas ("Mechanical alloying") tem se tornado uma alternativa de sucesso para obtenção destes compostos. Trata-se de uma técnica que envolve o processamento de pós elementares, permitindo uma mistura a nível atômico por intenso trabalho mecânico dos materiais constituintes. Neste trabalho obteve-se o intermetálico Nb_5Si_3 , que funde a $2484^{\circ}C$, a partir de pós de Si e Nb, com granulometria média de $10\mu m$, processados em um equipamento Spex 8000

mixer/mill, por 2h, em condições controladas de energia. As técnicas de difração de raios-x e microscopia eletrônica de varredura foram utilizadas para acompanhar a evolução do processo e para a caracterização do produto.

**SÍNTESE DO COMPOSTO $Fe_{25}Zn_{75}$ POR
MECHANICAL ALLOYING :
CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E
MAGNÉTICA.**

LIMA, J. C. DE; BORBA, E. C.; PADUANI, C.;
SANTOS, V. H. F. DOS; GRANDI, T. A.; PIRES, A.
N.; MITTELSTÄDT, F. G.

UFSC
RECHENBERG, H. R.
USP
DENICOLÓ, I.
UFPR
BARBOSA, A. F.
CBPF
KUNRATH, I.
UFRGS

A técnica Mechanical Alloying (MA) sintetiza materiais amorfos ou cristalinos em temperaturas abaixo da temperatura de cristalização dos elementos, através de reações de transformações no estado sólido. Esta técnica é recomendada para a obtenção de ligas para o sistema $Fe - Zn$. Neste trabalho, pó de ferro e zinco com alta pureza foram pesados separadamente e misturados para obter uma composição $Fe_{25}Zn_{75}$. A mistura foi lacrada em um recipiente cilíndrico de aço, em atmosfera inerte, juntamente com 10 esferas maciças de aço, sendo 9 delas de 10 mm e uma de 20 mm de diâmetro. A razão entre os pesos das esferas e da mistura era de 5 : 1. A mistura foi moída em um moinho de bolas tipo planetário. Quantidades da mistura inicial foram retiradas após 170, 360, 400 e 854 horas de moagem para acompanhar a evolução da formação da liga. Os padrões de difração de raios-X das 4 amostras são idênticos e bastante diferentes daqueles dos elementos puros Fe e Zn . Eles foram indexados à uma rede cúbica do tipo corpo centrado com parâmetro de rede igual a 9.0111 \AA . O espectro Mössbauer na temperatura ambiente mostra um dubleto bem resolvido, que é associado à presença de átomos Fe em dois sítios tetraédricos distintos na célula unitária. Sabendo que a técnica MA produz um produto final metaestável, mesmo na fase cristalina, fizemos um espectro de DSC que mostrou 2 picos distintos. O primeiro pico exotérmico localizado à $197^{\circ}C$ foi associado a uma relaxação estrutural enquanto o segundo pico endotérmico foi relacionado a uma possível transição de fase. Um tratamento térmico da amostra recolhida após 360 horas de moagem numa temperatura de $250^{\circ}C$ por 24 horas foi realizada, e o padrão de difração de raios-X para esta amostra foi novamente indexado à uma rede bcc, com parâmetro de

rede de 8.9936 Å, totalmente livre de defeitos e tensões introduzidas durante a formação da liga por MA. A comparação dos nossos resultados da indexação com os dados do cartão JCPDS-CDD referente ao composto Fe_4Zn_9 mostra um excelente acordo.

APPLICATION OF THE EMBEDDED-ATOM METHOD TO DEFECTS IN Fe-Cr ALLOYS

LIMA, M. S. F.; SCHON, C. G.

Departamento de Eng. Metalúrgica e de Materiais da Escola Politécnica da USP

The Embedded Atom Method (EAM) allows to investigate the total energy for an atomic ensemble considering short-range potential effects. The principal feature of the EAM is that this is a semi-empirical, density functional based, many-atom approach which must be supported by experimental evidences. In present study, the EAM was used to investigate dislocation cores of $\langle 111 \rangle$ screw dislocations in Fe-Cr BCC alloys. Interatomic potentials were calculated for Fe-Cr and Cr-Cr pairs using thermodynamic and lattice parameter data of disordered alloys. Apart from the problems related with the negative value of Cauchy pressure in Cr, that do not allow a good fit for this material, the results for the alloy was taken at least as qualitatively correct. The structure of dislocation core could be noticed by improved visualization technique. The central region of the dislocation core loses the normal three fold symmetry due to influence of the Cr atoms. The shape of the core at lower deformation levels ($4.14 \times 10^{-3} \mu$) is irregular, corresponding to the random location of the Cr atoms in the core region.

Modelos, Técnicas e Processos em Materiais (MAT) - 09/06/94

CRUZAMENTO DE NÍVEIS ELETRÔNICOS EM $KZnF_3:Cr^{3+}$

FREIRE, P. DE T. C.; PILLA⁺, O.; LEMOS, V.
Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Neste trabalho é estudada a transição de baixo campo cristalino para alto campo cristalino no $KZnF_3:Cr^{3+}$ induzida por pressão hidrostática. A detecção é feita através de medidas de luminescência para dois valores de temperatura: 90 K e temperatura ambiente. Medidas da separação Δ entre os estados eletrônicos excitados 4T_2 e 2E foram realizadas no intervalo de pressão de 0 a 12 GPa. A pressão de cruzamento entre estes dois níveis foi determinada como sendo: $P = 8.0$ GPa e $P = 6.2$ GPa para $T = 300$ K e $T = 90$ K, respectivamente.

Coefficientes de pressão de Δ e valores de parâmetros relacionados com a teoria do campo cristalino, foram calculados.

⁺ Professor visitante "Università degli Studi di Trento" - Itália

CARACTERIZAÇÃO FOTOACÚSTICA DE CATALISADORES

D'AGUIAR NETO, M. M. F.; NAKAMURA, O.

UFBA

A difusividade térmica, $\alpha = k/\rho C$, e a efusividade, $e = (k\rho C)^{1/2}$, (k : condutividade térmica; C : capacidade calorífica; ρ : densidade) dos sistemas catalíticos $CuCl_2/Al_2O_3$ e $CuCl_2/Nb_2O_5$ foram medidos em função da porosidade das amostras, por meio da espectroscopia fotoacústica dependente da frequência e em temperatura ambiente. O objetivo das medidas é elucidar a correlação existente entre as propriedades térmicas intrínsecas e, particularmente, aquela existente entre a porosidade e a eficiência do processo catalítico. As amostras foram preparadas usando a mesma quantidade da mistura em pó, comprimidas a diferentes pressões, resultando assim em amostras de diferentes densidades ou graus de porosidade. O efeito da porosidade no sinal fotoacústico foi deduzido a partir da variação do comportamento da frequência com relação àquele de um sólido compacto. Não foi observada uma relação linear entre o sinal fotoacústico e a porosidade das amostras. Para baixas frequências de modulação, onde a condutividade térmica é reduzida a transferência de calor é governada pelo volume poroso. A eficiência do processo catalítico cresce com o aumento da porosidade devido a maior superfície ativa do catalizador na reação. Mas, como observado para o sinal fotoacústico a relação entre a eficiência e a porosidade também não é linear. O trabalho está em progresso e o estudo espectroscópico usando o efeito fotoacústico, dependente da frequência, pode ser útil para quantificar o comportamento não linear observado.

CONTATOS OHMICOS EM GaAs

CRUZ, L. R. DE O.

IME-RJ

AVILLES, R. R. DE

PUC-RJ

Os contatos ôhmicos utilizados em GaAs são, geralmente, à base de ouro. Em particular, os sistemas Au-GeNi e AuZnAu são os que têm sido mais empregados no GaAs tipo n e tipo p, respectivamente. Ultimamente tem-se dado ênfase aos contatos não baseados em ouro com o objetivo de evitar a formação da liga de baixo ponto de fusão (AuGa) durante a fusão do contato. Esta liga compromete a estabilidade do contato em altas temperaturas. Neste trabalho, deposições de

filmes finos de cromo e alumínio foram realizadas sequencialmente, pelo método de evaporação térmica, sobre substratos de GaAs tipo p dopados com zinco. Os contatos foram produzidos através da deposição do sistema metálico sobre os substratos de GaAs com padrões gravados fotolitograficamente e do posterior lift-off. A caracterização elétrica foi realizada através das curvas corrente x voltagem de amostras recozidas e não recozidas. Tanto as amostras recozidas quanto as não recozidas apresentaram um comportamento ôhmico. Entretanto, a resistência total sofreu um decréscimo após o tratamento térmico. Análises de difração de raios-X com ângulo rasante estão sendo realizadas nas mesmas amostras a fim de estabelecer uma relação entre o comportamento elétrico observado e a presença dos compostos formados após o recozimento.

EFFECTS OF OPERATING PARAMETERS ON THE FORMATION OF TWO PLASMAS IN A DUAL CHAMBER.

MASSI, M.; MACIAL, H. S.; SUDANO, J. P.
Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA

A dual discharge chamber was especially designed to produce an inductively coupled plasma which could diffuse into a conventional cylindrical metallic chamber having permanent magnets distributed at the surface. By that means the radio frequency (RF) plasma becomes coupled to a quiescent plasma with a multidipole magnetic field confinement. We observe that the matching region between the two plasmas is strong dependent on the operating conditions of the discharge. Namely argon gas pressure in the range (10^{-3} - 10^{-1}) Torr, and RF power in the range (50 - 100)W. Measurements of electron temperature (T_e) and electron density (n_e) were carried out using a Langmuir probe with RF compensation in the probe circuit. The profiles of the plasma parameters along the axis of the dual chamber show that the transition region between the two plasmas is gradually formed when the source plasma operates in the E-mode. However at higher gas pressure the H-mode is easily formed and the transition becomes abrupt, with electron density varying from 10^8 cm^{-3} in the quiescent plasma to 10^{11} cm^{-3} in the RF plasma. In this work, the axial profiles of T_e and n_e were taken for various operating conditions to characterize the formation of the two different plasmas in the dual chamber. The case of abrupt transition of the plasma properties is typical of double layer formation as a matching agent between the quiescent plasma and the RF plasma. A model of the space charge structure of double layer comprising the streaming and reflected charged particles is presented to explain the abrupt transition region between the two plasmas.

DECOMPOSIÇÃO DO IODETO DE CHUMBO SOB A AÇÃO DE UM FEIXE ELETRÔNICO

VEIGA, W.

Laboratório de Materiais - Departamento de Física - UFPR

DUMKE, V. R.

Departamento de Física - UEPG

LEPIENSKI, C. M.

Laboratório de Materiais - Departamento de Física - UFPR

Cristais de Iodeto de chumbo, produzidos por reação de troca iônica, são submetidos à ação de feixe eletrônico gerado por microscópio de transmissão a 80 kV e 20 μ A. A ação do feixe é acompanhada em diferentes etapas verificando-se a formação de cavidades e precipitados. A evolução dessa formação é acompanhada por gravação em vídeo. É estudada a sequência das fases de decomposição do material, que se inicia com o aparecimento de discordâncias móveis, prossegue com a formação de vacâncias e cavidades e estabiliza-se com a nucleação de precipitados metálicos, cuja cinética de nucleação está sendo investigada.

Dependencia com a Temperatura e Freqüencia da Atenuação Ultra-Sônica e do Defeito do Módulo em Monocristais de Cobre

MORENO-GOBBI, A. O.

Facultad de Ciencias - Uruguay - Inst. de Física

EIRAS, J. A.

Universidade Federal de São Carlos - SP - Depto. de Física

É bem conhecido que a atenuação ultra-sônica e o defeito de módulo em cristais de cobre de elevada pureza devem-se principalmente as discordâncias no cristal. Medidas mostram que a atenuação ultra-sônica e defeito do módulo no intervalo de Mhz, em amostras cristalinas de cobre de elevada pureza, orientadas na direção $\langle 111 \rangle$ e deformadas plasticamente a temperatura ambiente, são devidas a dois diferentes mecanismos associados as discordâncias: ressonância de kinks (cadeia de kinks), e relaxação das discordâncias (relaxação de Bordoni).

Os ajustes dos dados experimentais aos modelos foram feitos com o método do Levensberg-Marquardt, assumindo uma densidade de kinks dependente da temperatura para o mecanismo da ressonância, e uma intensidade de relaxação para o pico de Bordoni. Considerou-se também uma única energia de ativação de 0.12 eV, obtida com dados mais representativos da literatura, e somente um tempo de relaxação.

Os ajustes assim realizados mostram um razoável acordo com os dados experimentais

INFLUÊNCIA DA ALCALINIDADE E DO TEOR DE ALUMÍNIO NA MORFOLOGIA E NO TAMANHO DOS CRISTAIS DA ZSM-5

MACHADO, M. DA S.; CARDOSO, D.

UFSCAR

SILVA, M. DE A. P. DA; AEGERTER, M. A.

IFQSC - USP

Neste trabalho estudou-se a influência da alcalinidade e do teor de alumínio da mistura reacional no tamanho e na morfologia dos cristais da zeolita ZSM-5. Os resultados indicam que com o aumento do teor de alumínio os cristais diminuem de tamanho devido ao aumento do grau de saturação que conseqüentemente aumenta o número de núcleos de cristalização. A medida que o pH da síntese diminui, o tamanho dos cristais aumenta devido ao aumento da solubilidade do aluminossilicato e conseqüentemente a diminuição do número de núcleos. O aumento do pH também provocou uma modificação na morfologia dos cristais que passou de prismas hexagonais alongados a paralelepípedos.

A Kinetic Study of Solventless TEOS Hydrolysis

DONATTI, D. A.; VOLLET, D. R.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

The kinetics of ultrasound-stimulated and *HCl*-catalyzed hydrolysis of solventless *TEOS*-water mixtures was studied, as a function of temperature, ranging from 10°C up to 65°C, by means of flux calorimetry measurements. A specially designed device was utilized for this purpose. The exothermic peak arising few minutes after sonication began, has been attributed mainly to the hydrolysis reaction. The overall hydrolysis process, which was measured through the irradiation time up to the hydrolysis peak, was found to be thermally activated, with an apparent activation energy $\Delta E = 36.4 \text{ kJ/mol}$. The alcohol produced at the early hydrolysis due to sonication, seems to further enhance the reaction, via a parallel autocatalytic path, which is controlled by a faster pseudo second order rate constant (*K*). Our modeling yielded $K = 6.3 \times 10^{-2} \text{ M}^{-1} \text{ min}^{-1}$ at 20°C, which is in reasonable agreement with the literature, and an activation energy $\Delta E = 40.4 \text{ kJ/mol}$ for the specific process of hydrolysis in presence of alcohol.

Efeitos do Etanol e do *HCl* na hidrólise do *TEOS* catalizado por ultrassom

DONATTI, D. A.; VOLLET, D. R.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

A hidrólise ácida, catalisada por ultrassom, da reação $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$ (*TEOS*) e H_2O foi estudada em temperatura de 35°C, em função de diferentes quantidades iniciais de Etanol e *HCl* adicionadas à mistura. A reação foi conduzida numa célula onde um estado estacionário

de fluxo de calor pôde ser mantido durante a irradiação por ultrassom. A hidrólise provoca o aparecimento de um pico exotérmico, centrado num tempo t_p , alguns minutos depois de iniciada a sonificação. A taxa da reação global até a hidrólise (*K*), foi considerada tomando-se o inverso de t_p . A velocidade específica da hidrólise foi relacionada com a largura do pico. Na região de $0.8 \leq \text{pH} \leq 2.0$, observamos que a inclinação da curva $\text{Log}(K) \text{ vs. pH}$, tende a um valor assintótico igual a -1, para valores de $\text{pH} \rightarrow 2$, em concordância com a catálise pelo íon hidrogênio. Observamos também um aumento na velocidade de reação da hidrólise, com a diminuição do *pH*. A adição de Etanol até a concentração de 4M, no sistema $\text{H}_2\text{O} : \text{TEOS} : \text{HCl}$, mantendo-se constante a proporção molar 4 : 1 : 0.003, reduz o tempo de indução (t_p) e também a velocidade da hidrólise.

Análise Térmica, Microdureza e Densidade aparente de Sono-geis de Sílica em função da temperatura de hidrólise

DONATTI, D. A.; VOLLET, D. R.; RODRIGUES, S. G.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

Sono-geis de Sílica, foram preparados em meio ácido, pela hidrólise e condensação do Tetra-Etil-Orto-Silicato (*TEOS*), $\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$, mantendo-se a relação molar de H_2O , *TEOS*, *HCl*, constante e igual a 6.6 : 1.0 : 0.053, respectivamente. As sono-soluções foram preparadas em recipiente de aço inoxidável (calorímetro de fluxo constante), em temperaturas que variam de 5 à 65°C. Após a homogeneização as sono-soluções foram colocadas em frascos plásticos selados à temperatura de 30°C, para permitir a gelificação. Observamos que o tempo de gelificação é inversamente proporcional à temperatura de preparação das sono-soluções. Medidas de densidade aparente (picnômetro de Mercúrio), realizadas com sono-geis envelhecidos à 30°C, mostraram ser independentes da temperatura de preparação das sono-soluções, mas aumentam com a temperatura do tratamento térmico (secagem). Medidas de microdureza Vickers, mostraram ser dependentes da temperatura de preparação das sono-soluções, variando de 30 à 60 Kg/mm^2 , para sono-geis envelhecidos à 30°C. Sono-geis tratados em temperaturas superiores, mostram um aumento da microdureza. Medidas de Análise Térmica Diferencial (*DTA*), permitiram estudar a secagem e densificação dos sono-geis em temperaturas de até 1100°C.

ESR INVESTIGATION OF WATER INDUCED CHANGES IN FERRI AND CHROMOSILICATE ZEOLITES

SANTO, L. L. DO E.; ROMANO, J. A.; MANSANARES, A. M.; GANDRA, F. C. G.; SILVA, E. C. DA

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

The study of iron and/or chromium ion states in silica zeolites is of great interest since new catalysts with different properties can be designed with these systems. These materials are specially important in hydrocarbon production process, humidity sensors and CO oxydation to CO₂. We have investigated the site distribution of the ions in the materials, ie, framework (substitutional, interstitial) and non-framework (as oxide clusters) positions. In this study we used Electron Spin Resonance as the main technique and Photoacoustic as auxiliary one. Substitutional sites are detected essentially by its high g-factors resonances. Studying the role that hydration water plays on the changes of the ESR-spectra obtained for ferrisilicate zeolites we found that substitutional iron ions have their local symmetry changed in the presence of the water molecules. The results show that dehydration restores the ESR-spectra and there are strong evidences that no migration of iron atoms occurs from the zeolite framework to other interstitial positions. For the case of the chromium ions we have preliminar results that suggests a similar interpretation we have indicated for the iron ions case. Photoacoustic Spectroscopy has been very useful in the case of the chromium samples because it can easily distinguish between the Cr³⁺ and Cr⁶⁺ ions. The ESR experiments were done using a conventional Varian E-Line spectrometer operating at microwave X-band. The experimental lines were fitted to the first derivative of a Lorentzian and the contribution of several sites to the same resonance was taken into account. The photoacoustic experiments were done in a commercial EDT - Photoacoustic Spectrometer operating in the 250 nm - 800 nm range.

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE PLASMA PULSADO PARA DEPOSIÇÃO DE FILMES EM SUBSTRATOS METÁLICOS.

ALVES JR, C.

UFRN

RODRIGUES, J. DE A.

UFSCar

Várias aplicações tecnológicas utilizando a tecnologia de plasma existem hoje, tanto em nível de pesquisa como em nível industrial. Dentre elas pode-se citar a deposição de filmes em diferentes substratos, metalurgia extrativa e maçaricos para corte e soldagem. Os filmes são utilizados para fins metalúrgicos (nitretação iônica, cementação, boretação, etc), opto-eletrônico (a-Si-H), entre outros. Neste trabalho, apresenta-se as

características de um sistema pulsado para deposição de filmes em substratos metálicos para diferentes fins, descrevendo tanto o equipamento como a interface para automação e aquisição de dados. O equipamento é composto de uma câmara, sistema de vácuo e fonte de alta tensão pulsada. A câmara possui uma construção que permite flexibilidade na sua utilização. Algumas sugestões de utilização são também fornecidas.

Estudo da transição lambda no enxofre líquido através de espalhamento Brillouin

ALVARENGA, A. D.

IFUSP

GRIMSDITCH, M.

Materials Science Division, Argonne Nat. Lab.

Fizemos um estudo da transição lambda no enxofre líquido por meio de espalhamento Brillouin. Na análise dos espectros despolarizados, a dependência com a temperatura da meia largura da asa Rayleigh, mostra uma pronunciada anomalia em torno da temperatura de transição lambda, cuja interpretação requer o desenvolvimento de um modelo microscópico. Os espectros polarizados foram interpretados de acordo com uma teoria hidrodinâmica simples, sendo ajustada a expressão de Mori-Zwanzig (1) às suas intensidades espalhadas. Os parâmetros resultantes dos ajustes: frequências Brillouin, razão dos calores específicos, velocidade adiabática do som, meia largura do pico Rayleigh e largura dos dubletos Brillouin, não mostraram quaisquer evidências da transição lambda. Diferenças entre nossos valores da velocidade do som comparada a de outros pesquisadores, sugere que a velocidade adiabática é dependente da frequência, indicando que o uso de uma teoria hidrodinâmica generalizada (2) poderia levar a resultados diferentes. (1) D. Forster "Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions" Reading, W. A. Benjamim, 1975 (2) R. Zwanzig, J. Chem. Phys. 43, 714 (1965)

APLICAÇÃO DO EFEITO FOTOACÚSTICO NA CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS DO CARVÃO DE BABAÇÚ.

ARAÚJO, D. B. DE; OLIVEIRA, A. C. DE

Universidade de Brasília

EMERICH, F.

UFES

Utilizamos neste trabalho a técnica de fotoacústica para estudar as propriedades térmicas de amostras do carvão do endocarpo de babaçú. A montagem utilizada consiste de uma célula fotoacústica de câmara única com incidência de irradiação pulsada sobre as duas faces opostas da amostra, não simultaneamente. Existe uma diferença de fase entre os sinais provenientes da amostra o que permite a determinação da difusividade térmica

do material. Esta quantidade está diretamente relacionada com parâmetros físicos importantes como condutividade térmica, densidade de massa e calor específico. As amostras de carvão do endocarpo de babaçú receberam tratamento térmico em temperaturas variando de 473K a 2473K. Procuramos encontrar relações existentes entre as características mencionadas anteriormente e os dados obtidos com essa técnica, o que possibilita a determinação do tratamento ideal para um melhor aproveitamento energético deste tipo de carvão, bem como uma série de outros parâmetros importantes nos cálculos de outras características deste material.

MEDIDA DA DIFUSIVIDADE TÉRMICA EM FILMES FINOS DE Nb_2O_5 POR TÉCNICA FOTOACÚSTICA.

OLIVEIRA NETO, J. E. DE; SAMPAIO, N. P.; FERREIRA, W. P.; SIQUEIRA, A. F.; JULIÃO, J. F.
UFC

Filmes de Nb_2O_5 foram obtidos por deposição anódica sobre substrato de Nióbio. A preparação prévia do substrato inclui um tratamento químico de modo a reduzir sua espessura até 20 μ , conveniente para a medida posterior. A determinação da espessura do filme foi feita por monitoramento in-situ, procedimento experimental previamente discutido [1]. A difusividade térmica foi obtida por técnica fotoacústica, usando-se para isso uma configuração de célula aberta. Observou-se que mesmo em substratos de espessuras superiores a mil vezes a espessura do filme a presença deste modifica sensivelmente a difusividade térmica do substrato. [1] A.F. Siqueira e J.F. Julião. X EFNNE - Recife (PE) - 1992.

ARTIFICIAL NEURAL NETWORK IN IDENTIFICATION OF A SUBSTANCE FROM MÖSSBAUER DATA

SALLES, E. O. T.; SOUZA JÚNIOR, P. A. DE
DEL - CT - UFES
GARG, V. K.
DF - UNB

A computer data bank of Mössbauer parameters and references of iron containing minerals reported in the literature from 1958 to 1993 has been created. The computer bank consists of source (matrix), isomer shift (I.S.), quadrupole splitting (Q.S.), internal magnetic field (H_{int}) and references of the publications. The data stored contains some 500 minerals and 5 megabyte of memory has been used. The isomer shift reported from different source/matrix has been converted to the alpha iron. An artificial neural network (ANN) of hybrid type applied to a counterpropagation (CPN) consisting of a Kohonen's Layer followed by a Grossberg's Layer was made to learn when fed with the I.S. and Q.S. values from the data bank. Only room temperature data was

fed to the computer for the identification of the minerals used as a test case (with 31 minerals) in the initial study. Once the ANN was trained it could identify the substance/mineral when its Mössbauer parameters were fed to the network that give single or multiple choice of the output (substance/mineral name). The success rate of the identification was close to 100%. The computer time of a PC IBM-XT in identification was much less than one minute every time the network was used. An extension of this network using Mössbauer parameters of all the minerals report in the literature is in advanced stage of completion. This were be useful to identify any unknow mineral studied just by feeding Mössbauer parameters to the network.

THEORETICAL DESCRIPTION OF THE BIDIMENSIONAL Ti IN-DIFFUSION IN

$LiNbO_3$
NUNES, F. D.; SILVA, H. F. DA; JUÚNIOR, J. S. A.; MENDES FILHO, J.
UFC

Optoelectronic devices for signal generation, transmission and processing, are of key importance for telecommunication. For them, the optical waveguide on planar substrate is a basic component for many integrated optical devices. They can be manufactured by different processes using a large variety of materials, being Ti in-diffusion in $LiNbO_3$ a well known and fundamental technological process. However, some physical points of this process still remain unclear, and we point out two: the diffusion path in the crystal followed by Ti through Li and/or Nb sites [1-2], the asymmetrical or not character of diffusion process [3]. Recently Ti in-diffusion process in $LiNbO_3$ was presented under a new conceptualization in which Ti diffuses in $LiNbO_3$ as an ion-exchange between Ti and Nb with observation of charge neutrality condition. In this framework the diffusion is studied with Nernst-Planck theory. A concentration dependent diffusivity emerges naturally from the model as a direct consequence of the electric field induced by ion dislocation in the lattice. In this work we present the results of using this new approach for Ti diffusion in $LiNbO_3$ in a bidimensional geometry. Ti concentration is obtained for different parameters such as the relation between Ti and Nb diffusivities and diffusion time.

[1] - Phys. Lett. A, 169 (1992), 177.

[2] - J. Appl. Phys., 60 (1986), 2343.

[3] - Dias Nunes - To be published in J. of Physics C - Condensed Matter

MODELO TEÓRICO PARA A FUNÇÃO DE ESPALHAMENTO EM GELS ANIÔNICOS

IZZO, D.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

MENDES JR, E.

Université Louis Pasteur, Strasbourg

Experiências recentes de espalhamento de neutrons em gels aniônicos indicam a existência de um pico para um determinado valor do vetor do onda q^* . Verificou-se também que a intensidade de espalhamento $I(q^*)$ depende de q^* segundo uma lei de escala, o mesmo ocorrendo para a dependência de q^* com ϕ , onde ϕ é a densidade do sistema. Mapeamos esse sistema numa solução diluída de polímeros estrela (de forma semelhante à sugerida por de Gennes) e então calculamos a função de espalhamento como um produto de um fator de estrutura para líquidos ("hard core") por um fator de forma para polímeros estrela (calculado exatamente). Em seguida o sistema foi mapeado numa solução semi-diluída, onde a função de espalhamento é um produto de um fator de estrutura do tipo "correlation hole" (soft core) pelo mesmo fator de forma usado anteriormente. Em ambos os casos, obtivemos expressões que apresentam picos na função de espalhamento; o primeiro modelo deve descrever um gel diluído (expandido), enquanto que o segundo deve descrever um gel mais concentrado.

CURVAS DE EMISSÃO E A FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DOS ELÉTRONS SECUNDÁRIOS EMITIDOS VERSUS ENERGIA DOS PRIMÁRIOS EM METAIS E POLÍMEROS

PINTÃO, C. A. F.

Depto. de Física - Faculdade de Ciências - UNESP - campus de Bauru

HESSEL, R.

Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP - Rio Claro - SP

GROSS, B.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP - São Carlos, SP

Um canhão de elétrons é utilizado como ferramenta de trabalho para irradiar amostras de metais e polímeros, na faixa de energia de 20 eV a 10 KeV. O sistema trabalha a um vácuo da ordem de 10^{-7} Torr, produzido

por uma Bomba Turbo Molecular em série com uma Bomba Rotativa, o que garante um sistema limpo com a possibilidade de atingir um vácuo de 10^{-10} Torr. A mudança de arranjo, na base do sistema de medidas, onde se encontra a amostra a ser irradiada, permitiu obter: (a) As curvas de emissão σ , η e δ versus a energia dos elétrons primários (E_0); (b) As energias associadas ao rendimento máximo de emissão (δ_m) e o rendimento unitário ($\delta = 1$), também denominadas E_{max} , primeiro e segundo "cross-over" respectivamente e (c) O espectro de energia dos secundários emitidos em função da energia pré-fixada E_0 dos primários.

ESTUDO EXPERIMENTAL DA EXPANSÃO DE VAPOR GERADO PELO BOMBARDEAMENTO DE URÂNIO SÓLIDO POR FEIXE DE ELÉTRONS

VASCONCELOS, G. DE; DAMIÃO, J.; RODRIGUES, N. A. S.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

No processo de separação isotópica via lasers, vapor de urânio metálico, gerado pelo bombardeamento de alvos sólidos por feixe de elétrons, é iluminado por feixe de lasers de modo a promover a ionização seletiva do ^{235}U . Posteriormente estes íons são coletados usando-se campo eletrostático. O objetivo deste trabalho é o de estudar experimentalmente os processos de geração e a expansão do vapor de urânio, visando otimizar o processo de separação isotópica. Será mostrado o valor da massa de urânio metálico depositada em qualquer ponto da câmara de evaporação, a variação da densidade em função da distância do cadinho, o fluxo de urânio metálico em função da potência, as curvas características da variação das massas em função do tempo, bem como o fluxo de massa em função da distância do material líquido.

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais I (MAT) - 10/06/94

Photothermal characterization of roughness, porosity and delamination: application to plasma modified materials

PELZL, J.

Institute of Experimental Physics III, Solid State Spectroscopy, Ruhr-University D-44780 Bochum, Federal Republic of Germany

The basic concept and different detection schemes of the photothermal techniques based on the photoacoustic effect, on the laser beam deflection and on infrared radiometry are briefly described. Main results of applications to

materials exposed to plasma surface interactions are reviewed. At first, photoacoustic investigations are presented to demonstrate the depth profiling ability and the lateral resolution of the thermal wave techniques. On metal plates exposed to tokamak divertor plasmas different types of material deposition and annealing effects such as delamination are identified by frequency dependent measurements. Graphite limiter tiles are found to exhibit thermal depth profiles already before plasma exposure which can be related to the surface roughness and porosity. Infrared radiometry has been applied to investigate the temperature variation of the thermophysical parameters up to 1200 K. The roughness effects are found to change with temperature which can be interpreted on the basis of a geometrical model taking into consideration radiation contributions from inside the heterogeneous material. This work is supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft, Kennwort *Photothermik*.

Photothermal reflectance microscopy: local characterization of heterogeneous materials

MANSANARES, A. M.

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

In the last ten years Photothermal Reflectance Microscopy has been used in the investigation of materials and devices, and has proved to be a useful tool in the characterization of their local thermal and electrical properties. The principle of the technique is based upon the variation of the sample refraction index induced by an external excitation. This index variation is probed by means of a laser beam reflection on the sample surface. The excitation can be provided by an intensity modulated laser beam, or by a modulated current injection when investigating devices in operation. The laser beams (probe and excitation) are focused on the sample surface, using an optical microscope, with spot sizes of about $1.0\mu\text{m}$ diameter. The thermal diffusion length is reduced to the micrometric scale by employing modulation frequencies in the MHz range. The sample is mounted on an x-y translation stage of $0.1\mu\text{m}$ step-size. Thus, scanning the sample, one can obtain photothermal images with sub-micrometric resolution. The technique has been used in the study of composites, semiconductors (implantation doses and uniformity, and polishing characterization in Si wafers, recombination velocity in decorated grain boundaries in Si), micro-electronic devices (bit programming implant in ROM, MOS-FET investigation) and opto-electronic devices (operating temperature of laser-diodes and detection of facet defects). Special attention has been devoted to the influence of thermal barriers (grain boundaries) in the heat diffusion in polycrystalline materials. The barrier scatters the thermal wave, introducing a local temperature perturbation which can be detected by the technique. Ceramics, sintered metallic samples and metallic films were investigated using photothermal microscopy. Recently, the thermal diffusivity of single grains of polycrystalline diamond was determined exploring the phase of the photothermal reflectance signal.

THERMAL LENS SPECTROMETRY: RECENT ADVANCES AND APPLICATION IN TRANSPARENT MATERIALS

BAESSO, M. L.

DFI, Universidade Estadual de Maringá

Thermal lens spectrometry (TLS) has proved to be a powerful technique to study transparent materials. The thermal lens effect is created when the excitation laser beam passes through the sample and the absorbed energy is converted into heat. The consequent change in the optical path length induced by a temperature rise will produce a lens-like optical element at the sample, the so-called thermal lens (TL). The propagation of a probe beam through the TL will be affected resulting in a spreading or focusing of the beam center. By measuring the probe beam center intensity variation in the far field, the photothermal properties of the samples can be determined. Successful applications have been achieved in ultra trace analysis; absolute fluorescent quantum yield measurement; photochemical reaction studies; thin film measurement; thermal diffusivity, thermal conductivity, temperature coefficient of refractive index (dn/dT) measurements, etc. Absorption as small as 10^{-7} cm^{-1} has been determined. This value is about four orders of magnitude more sensitive than that derived from conventional spectrophotometry. Since the first report of the thermal lens effect the sensitivity of the technique has been improved by changing the experimental configuration. The two-beam mode mismatched TLS method has been shown to be the most sensitive one. In this case the sample is positioned at the waist of the excitation laser beam, where the power density is maximum. The theoretical model for this configuration treats the thermal lens as an optical path length change

to the probe laser beam, and is expressed as an additional phase shift on the probe beam wave front after its passing through the sample. A simple analytical expression was obtained, allowing absolute measurements. Based on this quantitative treatment for TL effect, the aim of this work is to present the use of TLS in studies of: glasses, polymers and liquid crystals. Perspectives for new applications will be discussed.

Workshop: Técnicas de Caracterização de Materiais II (MAT) - 10/06/94

TÉCNICAS DE CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS NO CCDM

BOLFARINI, C.; NASCENTE, P. A. DE P.; ALCÂNTARA, N. G. DE

Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais, Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos

O Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais (CCDM) foi criado com a finalidade de prestar serviços às indústrias, institutos de pesquisa e universidades. Está estruturado em três áreas de atuação: caracterizações química e física e análise microestrutural. Esta comunicação discorre sobre seus equipamentos, técnicas correlatas e aplicações.

A caracterização química conta com um espectrômetro de emissão por plasma (ICP), um analisador C/S, um espectrofotômetro de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), um espectrômetro por ressonância magnética nuclear (RMN), um cromatógrafo por permeação de gel (GPC) e um cromatógrafo líquido (HPLC).

A caracterização física conta com um difratômetro de raios-X (XRD), um sistema de análise térmica (TG/DTA/DSC), um analisador de adsorção física (BET), um porosímetro de mercúrio, um analisador de tamanho de partículas e um picnômetro de hélio.

Entre os equipamentos de análise microestrutural destacam-se um microscópio eletrônico analítico de transmissão (TEM) equipado com espectroscopia de perda de energia de elétrons (EELS) e espectroscopia de energia dispersiva de raios-X (EDS), um microscópio eletrônico de varredura (SEM) com EDS e espectroscopia dispersiva de comprimento de onda (WDS) e um espectrômetro de superfícies equipado com espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS), espectroscopia de elétrons de Auger (AES), microscopia de Auger de varredura (SAM), espectroscopia de espalhamento de íons (ISS) e imageamento de fotoelétrons excitados por raios-X (XPI).

Estas técnicas analíticas são empregadas na caracterização de materiais metálicos, poliméricos, cerâmicos e compósitos. As principais aplicações são em metalurgia, cerâmica (convencional e avançada), semicondutores, catalisadores, plásticos, fibras e vidros.

Materiais de Interesse Tecnológico: Vidros, Cerâmicas e outros (MAT) - 10/06/94

CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS DE INTERESSE TECNOLÓGICO UTILIZANDO-SE RAIOS X : SUPERCONDUTORES

FERRAZ, M. C.; BASSO, H. C.; MASCARENHAS, Y. P.

Instituto de Física e Química de São Carlos

Estudou-se a cinética de reação de formação do supercondutor $YBa_2Cu_3O_7$ por difração de raios X, utilizando-se o Método de Rietveld. Amostras foram produzidas a 850, 900 e 950° C com tempo de reação no intervalo de 0.5 a 23.2 h. A difratometria foi realizada utilizando-se o difratômetro Rotaflex da Rigaku-

Denki, com radiação $K\alpha$ do Cu. A composição de cada fase nos diferentes estágios da reação (análise quantitativa e qualitativa) foi obtida através do uso do Método de Rietveld. A fase Y_2BaCuO_5 foi encontrada como um composto intermediário na rota de formação do $YBa_2Cu_3O_7$. Através de uma soma de exponenciais foram traçadas curvas da composição em função do tempo de reação para cada temperatura de tratamento, levando à análise da cinética química das reações. Bons resultados foram obtidos mostrando mais uma vez que o Método de Rietveld é muito útil na caracterização de compostos cristalinos.

ESTUDO DA CRISTALIZAÇÃO DO VIDRO METÁLICO METGLAS 2605S-2 POR RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA

BIASI, R. S. DE; ARAÚJO, S. M. V.
Instituto Militar de Engenharia

A estabilidade térmica de vidros metálicos é um assunto de grande interesse, já que a cristalização pode afetar profundamente as propriedades mecânicas, elétricas e magnéticas dessas ligas metálicas. A ressonância ferromagnética (RFM) é um meio conveniente para estudar a cristalização dos vidros metálicos, pois se trata de uma técnica rápida, sensível e não-destrutiva. No presente trabalho, a técnica da RFM foi usada para estudar a cristalização do vidro metálico $Fe_{78}B_{13}Si_{19}$ (Metglas 2605S-2). A largura de linha da curva de ressonância foi medida para vários tempos de tratamento isotérmico a 733, 743 e 753 K. A fração transformada, determinada a partir dos dados de RFM, segue a equação de Johnson-Mehl-Avrami com o expoente n igual a 1,92, resultado compatível com um processo de crescimento controlado por difusão com uma taxa decrescente de nucleação. A energia de ativação para cristalização, calculada a partir do tempo de tratamento necessário para que a largura de linha atinja três valores diferentes, é estimada em 351 kJ/mol, um valor um pouco maior que o medido anteriormente para a primeira cristalização da liga Metglas 2605S-2, 326 kJ/mol.

NOVOS RESULTADOS EM NUCLEAÇÃO ADIABÁTICA PARA VIDROS ÓXIDOS E CALCOGÊNICOS

SILVEIRA, M. F. DA; BRASIL, V. DE B.; MEYER, E.
Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro

O Modelo de Nucleação Adiabática (MNA), tem sido usado com sucesso para prever quando um líquido puro e homogêneo apresenta nucleação homogênea ou não. De acordo com o MNA a temperatura de super-resfriamento máximo (T_{14}^-), pode ser calculada através de uma equação simples:

$$T_{14}^-/T_M = (\Delta h_l/c_p T_M) \times \left\{ (1,67 - 0,26/\sqrt{Q})(\exp(\Delta h_l/c_p T_M) - 1) \right\}^{-1}$$

onde T_M representa a temperatura absoluta de fusão, Δh_l o calor latente de fusão, c_p o calor específico médio das fases líquida e sólida na temperatura de fusão e Q o número de átomos por molécula. Neste trabalho apresentamos os mais recentes resultados da aplicação do MNA em vidros óxidos e calcogênicos. Os vidros, em geral, são materiais para os quais o MNA tem apresentado muito bons resultados na previsão de quais sistemas têm chance de apresentar nucleação homogênea, quando lentamente resfriados a partir da temperatura de fusão. Nestes casos a temperatura de vitrificação

(T_g) é aproximadamente igual a T_{14}^- . Resultados recentes do MNA aplicado a vidros óxidos, considerando a dependência do calor específico com a temperatura, demonstraram que esta correção oferece apenas uma leve melhora na precisão do resultado dado pela equação acima. De forma que para os vidros óxidos e calcogênicos fica confirmada a regra geral para o MNA:

1. $T_g > T_{14}^-$: para vidros obtidos por resfriamento lento.
2. $T_g \approx T_{14}^-$: para vidros obtidos somente por resfriamento rápido.
3. $T_g < T_{14}^-$: para materiais que não vitrificam por resfriamento a partir do ponto de fusão.

CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS DE FLUORETO DE ÍNDIO UTILIZANDO A TÉCNICA DE EXAFS E ESPECTROSCOPIA RAMAN.

MASTELARO, V. R.
Departamento de Engenharia de Materiais UFSCar - São Carlos, S.P.
RIBEIRO, S.; DINIZ, R.
Instituto de Química - UNESP Araraquara Araraquara, S.P.
MESSADEQ, Y.; AEGERTER, M.
Instituto de Física e Química de São Carlos DFCM - USP São Carlos, S.P.

O estudo de vidros à base de fluoretos de metais pesados tem recebido grande atenção principalmente devido à sua aplicabilidade no campo de telecomunicações, como materiais transparentes na região do infravermelho. Mais recentemente, os vidros à base de InF_3 tem se configurado como a melhor opção por apresentar uma região maior de transmissão no infravermelho e melhor resistência química. São apresentados neste trabalho resultados de absorção de Raios-X (EXAFS) e de espalhamento Raman para vidros nos sistemas binários $InF_3 - BaF_2$ e $InF_3 - SrF_2$. Os resultados obtidos mostraram que os vidros são compostos por unidades básicas InF_6 com o número de átomos de fluor em posição terminal aumentando com a diminuição da concentração relativa de InF_3 .

CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS DE INTERESSE TECNOLÓGICO UTILIZANDO-SE RAIOS X : ZIRCÔNIA

FOSCHINI, C. R.; PINATTI, D. P. F. S.; PAULLIN FILHO, P. I.
Departamento de Engenharia de Materiais - UFSCar
FERRAZ, M. C.; BASSO, H. C.; MASCARENHAS, Y. P.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Devido à sua grande variação em estrutura e propriedades, a zircônia vem se tornando objeto de inúmeros estudos. Afim de explorar as propriedades da zircônia

, o óxido necessita ser modificado pela adição de agentes estabilizantes. A zircônia apresenta três diferentes fases polimórficas: monoclinica, tetragonal e cúbica. Como esta transformação de fase é acompanhada de uma grande variação do volume, causando um efeito prejudicial na resistência ao choque térmico, a forma estabilizada do óxido se torna preferida na maioria das aplicações. O objetivo deste trabalho é estudar o efeito de dopagem de alguns metais de transição (Fe, Ni, Cu, Mn, por exemplo) na estabilização da fase tetragonal da zircônia no sistema $ZrO_2 - CeO_2$ (Ce-TZP) com a análise quantitativa feita por raios-X. A difratometria ("step-scan") foi realizada utilizando-se o difratômetro Rotaflex da Rigaku-Denki, com radiação $K\alpha$ do Cu. A análise quantitativa e qualitativa dos materiais foram feitas através do uso do Método de Rietveld.

FILMES DE VIDROS DE FLUORETOS

DELBEN, A. A. S. T.; DELBEN, J. R. J.; SALVETTI, A. R.
UFMS
MACEDO, M.
UFSE

O interesse das pesquisas em vidros de fluoretos, nos últimos anos, deslocou-se das fibras óticas para telecomunicações de longo alcance (tipo transcontinentais) para aplicações onde as exigências de pureza não sejam tão acentuadas, como nas fibras para cirurgia a laser, sensoriamento químico, termometria remota e nos amplificadores óticos. Os vidros de fluoretos apresentam ainda propriedades de condutividade iônica acentuada pela inclusão de LiF na sua composição. Neste caso, a obtenção de filmes condutores baseados nestes materiais apresentaria aplicações práticas. Alguns testes de preparação de filmes sobre substrato de sílica vem sendo realizados na UFMS. Inicialmente, estamos preparando os vidros pela técnica de fusão, com posterior derrame sobre vidros de sílica previamente aquecidos até temperaturas próximas da transição vítrea do vidro de fluoretos. Temos variado a composição e a temperatura em que os vidros são derramados, de forma a promover a aderência do filme de fluoretos ao substrato de sílica.

NOVA TECNOLOGIA EM PONTAS DE DIAMANTE-CVD APLICADAS NA ODONTOLOGIA E NA INDÚSTRIA.

TRAVA-AIROLDI, V. J.; CORAT, E. J.; LEITE, N. F.
LAS/INPE
PENA †, A. F. V.
UNESP-FCT- Presidente Prudente
VALERA, M. C.; RIBEIRO, J. DE F.
UNESP-FO- São José dos Campos

Neste trabalho é apresentado desenvolvimento de uma nova tecnologia em pontas de diamante CVD aplicadas na odontologia e na indústria. Desenvolveu-se,

também, solda adequada para interfaces de diamante CVD e aço inox, completamente compatível biologicamente e com muitos outros materiais. São efetuados exaustivos testes comparativos entre pontas diamantadas convencionais e pontas diamantadas desta nova tecnologia, conceitualmente diferente e completamente desenvolvida no Brasil. Medidas da durabilidade dessas pontas e qualidade de acabamento na superfície submetida a estas pontas, mostram expressiva vantagem para este novo conceito. Estes testes foram efetuados em vidro, makor e em ligas metálicas de alta dureza. Testes de material dental "in vitro" de acréscimo de temperatura na câmara pulpar causado por desgaste na superfície do dente por estes dois tipos de ponta são também parte importante deste trabalho.

†Bolsa RHAE

Surface Crystallization in Cordierite Glass - Morphologies and their Infrared and Raman

Micro-Spectra
ZIEMATH, E. C.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro
MORA, N. D.; ZANOTTO, E. D.

Departamento de Engenharia de Materiais, UFSCar, São Carlos

Cordierite glass, $2MgO \cdot 2Al_2O_3 \cdot 5SiO_2$, suffers surface crystallization when submitted to thermal treatments above $800^\circ C$. Depending on the temperature and time treatments, different crystal morphologies occur: regular and elongated hexagones (μ -cordierite), lozenges (X-phase), sphericals, and squares. Thus, it is possible to obtain a crystallized surface layer with a thickness higher than $10 \mu m$ composed by crystals of those morphologies. Qualitative studies about the crystalline structure of each morphology has been performed through Fourier transform infrared reflection and Raman micro-spectra measurements. With the help of an optical microscope coupled to the infrared and Raman spectrometers, it was possible to measure the spectra of very small areas on macroscopic samples. Through appropriate thermal treatments, each morphology or an agglomerate of one of these can be obtained with sufficient high area to enable the measure of its micro-spectra. An interesting conclusion is that the crystals with spherical morphology have a higher ordering degree than the other ones. Financial support: CNPq, CNPq/RHAE-NM.

ESTUDO DE FASES SUPERCONDUTORAS DE ALTA- T_c NO SISTEMA Bi-Sr-Ca-Cu-O.

NEVES, M. A.; PEREIRA, R. F. R.; SILVEIRA, M. F. D.
UFRJ

O sistema Bi-Sr-Ca-Cu-O é de grande interesse científico por apresentar três fases supercondutoras, duas

das quais de alta- T_c . Em termos de Ciência dos Materiais, este sistema apresenta dificuldades intrínsecas para obtenção de amostras monofásicas. Este trabalho é uma contribuição para o esclarecimento da influência da composição nominal Bi:Sr:Ca:Cu e da temperatura de síntese sobre a formação das fases supercondutoras de alta- T_c em amostras policristalinas deste sistema. A caracterização das amostras envolveu medidas de Efeito Meissner, difração de raios-X, análise térmica diferencial e termogravimetria. Também avaliou-se a influência da variação na quantidade de oxigênio sobre as transições supercondutoras observadas. Os resultados demonstram coexistência das duas fases de alta- T_c , independente da composição e da temperatura. Porém, em algumas amostras não foi detectada a transição da fase de mais alta T_c . Isto remete a uma analogia com os supercondutores A-15, devido a uma possível relação entre as condições de estabilidade estrutural das fases na temperatura ambiente e o desenvolvimento de transições supercondutoras. Além disso, apontam para uma possível "competição" entre estas fases, tanto em termos de formação estrutural como em termos de formação do estado supercondutor.

ELETRODIFUSÃO, ABSORÇÃO ÓTICA E TERMOLUMINESCÊNCIA NO QUARTZO NATURAL BRASILEIRO

YUKIMITU, K.

FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA
UNESP

WATANABE, S.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, IFUSP

No presente trabalho, foi montado um sistema de eletrodifusão, o primeiro no País, para o estudo dos efeitos da substituição de ions alcalinos, Li^+ e/ou Na^+ , no canal estrutural, por ions de hidrogênio, H^+ , e também de potássio, K^+ , nas propriedades óticas e de termoluminescência do quartzo natural brasileiro. A corrente elétrica da eletrólise apresenta, na parte inicial do aquecimento, um pico de corrente devido ao dipolo $[Al^{3+}/M^+]$, onde $M^+ = Li^+$ ou Na^+ . A absorção ótica na região do infravermelho do quartzo com e sem eletrodifusão confirma a presença desse dipolo. As medidas de termoluminescência e absorção ótica, na região visível e da ultra violeta, foram feitas em amostras de quartzo eletrodifundidas e não eletrodifundidas. Elas mostram que os alcalinos fazem o papel de estabilizadores do centro (Al^{3+}/M^+) . A irradiação com raios X quebra este centro, transformando M^+ em M^0 intersticial após receber um electron e, deixando o centro de buraco $(AlO_4)^0$. O aquecimento em temperatura perto ou acima de $280^\circ C$ libera o electron de M^0 intersticial, que se recombina com o buraco do centro $(AlO_4)^0$, emitindo a luz TL. // (Trabalho subvencionado pela FAPESP, FINEP e CNPQ)

ELETRODIFUSÃO, ABSORÇÃO ÓTICA E TERMOLUMINESCÊNCIA NO BERILO NATURAL BRASILEIRO

YUKIMITU, K.

FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA
UNESP

WATANABE, S.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA NUCLEAR, IFUSP

No presente trabalho, foi montado um sistema de eletrodifusão, para o estudo de seus efeitos na termoluminescência do berilo natural brasileiro, no caso aguamarinha. Sabe-se que no canal estrutural do berilo alojam-se inúmeras impurezas, sendo H_2O e CO_2 as moléculas mais comumente encontradas. A aguamarinha deve sua coloração azul à presença de Fe^{3+} , que entra substituindo Si^{4+} . Ao invés dos ions de Cs^+ que se associam aos ions de Fe^{3+} formando os dipolos (Fe^{3+}/Cs^+) . O comportamento desses dipolos difere muito do dos dipolos $(Al^{3+}/Li^+$ ou $Na^+)$ devido à diferença dos raios iônicos desses alcalinos. O raio iônico do Cs^+ é mais do dobro do de Li^+ e pouco menor do dobro do de Na^+ , tornando sua mobilidade mais difil, além da presença de moléculas de H_2O e CO_2 no canal aumentar essa dificuldade. Isto explica, também, porque é necessário uma dose de radiação da ordem de 50 Gy para poder observar a termoluminescência no berilo. // (Trabalho subvencionado pela FAPESP, FINEP e CNPQ)

RADIATION FIELD CHARACTERIZATION OF PIEZOELECTRIC COMPOSITES 1-3

NEGREIRA, C. A.; AULET, A.

Instituto de Física - Fac. de Ciências (Montevideo -
Uruguay)

BASSORA, L. A.; EIRAS, J. A.

UFSCar - São Carlos - SP

Piezoelectric composites polymer-ceramic 1-3 show high potential to be used in medical applications due to their low acoustical impedance. Medical imaging transducer require high sensibility and high lateral resolution. The lateral resolution depends mainly on the transducer's geometry, but can be affected if the vibration of the piezoelectric element is not a "pure" thickness mode. In piezoelectric composites 1-3, lateral resonances can be excited depending on the ceramic rod's periodicity. The behavior of the airbacked transducers, mounted using piezoelectric composites 1-3 (polyurethane - PZT) was determined at temperature room. The composites were prepared with ceramic concentrations varying between 14 and 42 vol. %. Besides admittance and acousto-electric response measurements and insight into the sound field structure is obtained using a wavelength precision acoustic measuring system with micro-positioners in water tank. A pulse-echo method allowed the analysis of the acousto-electric spectrum response.

The radiation pattern profile was also analysed to identify the effects of the composites lateral resonances on the field. The experimental results are discussed based on the periodic composite structure.

ESTUDO DA ABSORÇÃO DE RÁDIO FREQUÊNCIA POR FILMES FINOS SUPERCONDUTORES A ALTA TEMPERATURA

CAJATY, G. B.; OLIVEIRA, A. C. DE; TELES, D. L.
Unb

O estudo da absorção de RF por cerâmica supercondutora a alta temperatura tem sido registrada desde a descoberta desta nova série de supercondutores. A curva de absorção surge quando a amostra está sujeita a um campo Dc modulado próximo de zero e mostra-se independente da frequência, ocorrendo inclusive na região de micro-ondas. Neste trabalho apresentamos o estudo de absorção de RF por filmes finos supercondutores, determinamos a transição de fase através da suscetibilidade magnética, e a curva de profundidade de penetração de campo magnético em função da temperatura. Apresentamos um estudo comparativo com amostras obtidas com três técnicas distintas, (MBE, sputtering, MCVD), e ainda de monocristal. Estudaremos também a absorção de filmes finos de diferentes espessuras, no plano a-b e ao longo do eixo c. No trabalho de absorção de RF por supercondutor policristalino propusemos o modelo de frente de onda para a absorção de RF, com este trabalho em filme fino e monocristais, teremos condições de testar a validade deste modelo. Para essa comparação, apresentamos o estudo da absorção em função da temperatura. Finalmente apresentamos a absorção como função do campo magnético modulado.

MEDIDA DE PROFUNDIDADE DE PENETRAÇÃO DE CAMPO MAGNÉTICO DE SUPERCONDUTOR CERÂMICO

CAMPOS, F. A.; OLIVEIRA, A. C. DE; TELES, D.
Unb

Utilizamos uma das principais características de um supercondutor que é o efeito meissner, para calcularmos a profundidade de penetração de campo magnético no interior de um supercondutor cerâmico (Y Ba Cu O), quando este sofre uma transição de seu estado supercondutor para o seu estado normal. Através de uma montagem experimental constituída por um circuito oscilador Robinson, que gera um sinal RF em uma bobina que circunda a amostra supercondutora com a temperatura crítica de aproximadamente 92K, construímos a curva característica da amostra medindo a frequência de oscilação no circuito em função da temperatura. Partindo do fato de que a indutância de uma bobina é proporcional à área por onde passa o fluxo magnético, chegamos a uma expressão de profundidade de pene-

tração em função da temperatura, utilizando a curva frequência em função da temperatura. Os resultados obtidos estão de bom acordo com o método desenvolvido por Gorter-Casimir.

NANOCRISTAIS DE SEMICONDUTORES CdS_xSe_{1-x} : ESTUDO POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X A BAIXOS ÂNGULOS.

RAMOS, A. Y.
*IFGW, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil e
LMCP-CNRS, Paris, França
TCHOUBAR, D.; PONS, C.
CRMD-CNRS, Orleans, França*

As propriedades ópticas dos vidros dopados com nanocristais semicondutores são muito sensíveis às características geométricas das partículas (forma, superfície, tamanho e distribuição de tamanhos...). Assim torna-se necessária uma caracterização estrutural dessas partículas o mais detalhada possível. Vidros dopados com nanocristais de sulfoseleneto de cádmio com tamanhos na faixa de 3nm a 10nm foram estudados por espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS). O tamanho e a distribuição de tamanhos dos nanocristais foram comparados com resultados obtidos por outros métodos experimentais (HRTEM e Raman a baixa frequência). Os desvios entre as diversas medidas foram atribuídos a características estruturais da superfície das nanopartículas espalhadoras. Angularidades nessa superfície foram evidenciadas por SAXS a partir do estudo da intensidade espalhada no limite de grandes vetores de espalhamento. Isso permite concluir a existência de uma camada cristalina distorcida de alguns ângstroms na superfície dos nanocristais. RHAECNPq.

PROPERTIES OF QUARTZ AND ITS APPLICATION TO GEOLOGICAL DATING.

ORTEGA, N. R. S.; WATANABE, S.
*Instituto de Física USP
ARENAS, J. S. A.
Univ. San Agustín de Arequipa-PERU
BARRETO, A. M. F.
Intstituto de Geociências USP*

From waterway ravine through Cananea's Island three sites were selected for samples collection. The first one was localized approximately 70 meters from Gloria's Hotel, samples of five depth were collected for these experiments. The first one was collected from about 110 centimeters below surface (HG-1), the second one about 100 centimeters below (HG-2), the third one (HG-3) and fourth one (HG-4), each one 100 centimeters below previous one. At the continent samples were collected from two other sites, Vila Cubatão and Ponta Aroeira, in each case from two depths. One about

100 centimeters below surface (CB-1 and PA-1) and other about 200 centimeters (CB-2 and PA-2). These samples were taken from sites located 30 centimeters from horizontally ravine face. They were washed, first with sulfuric acid, and then with hydrofluoric acid. The sand grains were selected with size between 88 and 176 micro-meters of diameter. From each sample a portion was separated for the TLN (Natural TL) reading and remaining portion was submitted to radiation dose in the range 100 to 500 Gy for subsequent TLA reading. From these data it has been determined the accumulated natural doses: 146.3Gy for HG-1, 205.9 Gy for HG-2, 439.6 Gy for HG-3, 322.8 Gy for HG-4, 131.7 Gy for CB-1, 245.4 Gy for CB-2, 115.3 Gy for PA-1, and 537 Gy for PA-2. Assuming as average annual dose of 0.0018 Gy/year an estimate of 81,270, 114,360, 244,200, 179,320, 73,150, 136,350, 64,030 and 298,350 years was obtained for these samples. These values agree with ages estimated by geologists.

ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASES PSEUDO BINÁRIO BaO - CuO_x

MACHADO, A. J. S.

*Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL
/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR*

JARDIM, R. F.

Instituto de Física da USP

Neste trabalho mostraremos um estudo do equilíbrio de fases no sistema BaO - CuO_x entre as temperaturas de 800 °C e 1200 °C, utilizando BaCO₃ como precursor do BaO, devido a alta instabilidade deste óxido. Serão apresentados resultados de raios X, análise térmica diferencial, análise microestrutural (ceramografia) e microdureza, para verificação das fases deste sistema. Os resultados obtidos confirmam a presença de duas fases estequiométricas (BaCuO₂ e Ba₂CuO₃), no entanto os resultados com relação a fase de estequiometria Ba₂CuO₃ mostram que esta fase é meta-estável, contrariamente aos resultados reportados na literatura.

ON THE TRANSFORMATION OF Y₂Cu₂O₅ INTO YCuO₂

MACHADO, A. J. S.

*Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL
/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR*

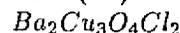
JARDIM, R. F.

Instituto de Física da USP

The pseudo-binary system YO_{1.5}-CuO_x was investigated in the range Y_wCu_{1-w}O_x (0.1 < w < 0.9) by x ray powder diffraction, thermal analysis, and iodometric titration. From X ray diffraction results obtained on polycrystalline samples prepared at ambient pressure and from different starting materials, sintering temperatures, and reducing atmospheres, two stoichiometric phases were confirmed: Y₂Cu₂O₅ and YCuO₂. A combined

analysis of the results from thermal analysis and from iodometric titration reveals that the YCuO₂ phase is retained at higher temperatures and reducing atmospheres, which is consistent with the presence of Cu⁺¹. The transformation of the Y₂Cu₂O₅ and YCuO₂ with increasing temperature and the formation kinetics of YCuO₂ phase are discussed. Also, a YO_{1.5} - CuO_x phase diagram is proposed.

ESTUDO DO LIMITE DE SOLUBILIDADE DO ESTRONCIO (Sr) NO COMPOSTO



FAGUNDES, A.; MACHADO, A. J. S.; SANTOS, C. A.
M. DOS; FERREIRA, B.

*Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL
/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR*

Depois da descoberta de supercondutores de infinitas camadas em compostos binários em óxidos, muita atenção tem sido dada aos sistemas Ba-Cu-O-Cl, Sr-Cu-O-Cl e Ca-Cu-O-Cl; sendo que os estudos inicialmente foram realizados por von R. Kipka e colaboradores. Medidas preliminares de magnetização no composto Ba₂Cu₃O₄Cl₂, revelam duas transições diamagnéticas, estimulando o estudo da supercondutividade neste sistema. Neste trabalho estudamos o limite de solubilidade do composto Ba₂Cu₃O₄Cl₂ dopado com Sr. Para tanto foram preparadas amostras na estequiometria Ba_{2-x}Sr_xCu₃O_yCl_w com 0 < x < 2. As amostras foram caracterizadas por difração de raios X, análise térmica diferencial (TGA e DTA), medidas do teor de oxigênio (via análise potenciométrica) e microestrutura (ceramografia). Serão mostrados resultados que revelam que a solubilidade é total nas concentrações estudadas.

ESTUDO DO COMPORTAMENTO DE PÓ DE Ta DURANTE Prensagem UNIAXIAL

FREITAS, D. DE; HOLANDA, J. N. F. DE

*Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR / Faculdade
de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL*

GOMES, U. U.

*Departamento de Física / Universidade Federal do Rio
Grande do Norte - UFRN*

O Ta tem como principal aplicação a obtenção de ânodos porosos para a fabricação de capacitores eletrolíticos de alta carga específica (CV/g). A obtenção de corpos com baixa densidade a verde é uma condição essencial para assegurar alta porosidade no corpo sinterizado, sendo um dos fatores que maximizam o valor da carga específica do capacitor. Portanto, nesse trabalho é apresentado um estudo sobre o comportamento do pó de Ta, obtido via redução por sódio, durante prensagem uniaxial em matriz de aço, objetivando a obtenção de corpos com baixa densidade a verde. Foi

levantada uma curva de compactação no sentido de determinar as condições ótimas de prensagem. São apresentados também os resultados das medidas de densidades aparente, batida, teórica e relativa, distribuição de tamanho de partícula (sedígrafo), superfície específica (BET), morfologia das partículas (MEV) e composição química.

OBTENÇÃO DO TITANATO DE BÁRIO (BaTiO₃) PELO MÉTODO DE CO-PRECIPITAÇÃO

BENTO, C. A.

*Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL
/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR*

O BaTiO₃ é uma cerâmica eletrônica largamente utilizada na fabricação de termistores, capacitores em multicamadas (MLCs) e equipamentos eletro-ópticos. Comercialmente, o pó de BaTiO₃ tem sido obtido através da calcinação da mistura do óxido de titânio (TiO₂) com Carbonato de Bário (BaCO₃). Este método possibilita a formação de frações de partículas grosseiras e o aparecimento de multifases. Quando cerâmicas dielétricas com fórmulas complexas são requisitadas, este método produz microheterogeneidades, dificultando uma perfeita taxa química entre cátions em escala submícron. Este trabalho apresenta uma rota alternativa, utilizando a co-precipitação ou co-decomplexação, visando eliminar esses problemas. Uma mistura altamente solúvel dos precursores Cloreto de titonila (TiOCl₂) e Cloreto de bário (BaCl₂) é precipitada com Ácido Oxálico (C₂H₂O₄) e o precipitado sofre uma pirólise simples com formação do BaTiO₃. O pó foi caracterizado utilizando algumas técnicas como: Difração de raios X, para determinar a estrutura cristalina; Multisizer, distribuição de partículas; DTA e DTG, transformações de fase; BET, para área superficial, etc.

PREPARAÇÃO CERAMOGRAFICA DE CERÂMICAS À BASE DE NITRETO DE SILÍCIO

SILVA, V. A.

*Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL
/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR*

B. FILHO, N. C.; GONÇALVES, R. D.; SILVA, O. M. M.

*Centro Tecnológico Aeroespacial - CTA / Divisão de
Materiais - AMR - IAE*

O Si₃N₄ encontra-se situado na categoria dos materiais cerâmicos avançados, com uma combinação de excelentes propriedades termo-mecânicas, que o qualificam como um excelente material para emprego em motores, ferramentas de corte, máquinas térmicas, etc..

Houve nos últimos anos, um grande avanço na desenvolvimento desses materiais, bem como na descoberta de novos agentes de sinterização e métodos mais avançados de sinterização como: Prensagem a quente, Prensagem isostática a quente e Pressão gasosa em excesso. No entanto, devido a não existência de informações abrangentes com relação ao tipo de ataque químico e métodos empregados para revelação da microestrutura dessas cerâmicas em microscópio eletrônico de varredura (MEV), fomos motivados a observar experimentalmente os ataques químicos mais efetivos para os sistemas investigados: SN - Y₂O₃, SN-CeO-2, SN-CTR-CEMAR (Concentrado de Terras Raras). Mostraremos também resultados de difração de Raios X, microscopia eletrônica de varredura e microdureza Vickers para os sistemas usados nos ataques.

PROPRIEDADES

TERMOLUMINESCENTES DO TOPÁZIO

SOUZA, D. DO N.; LIMA, J. F. DE; VALERIO, M. E.

G.

UFS

Está sendo feita a análise do comportamento da emissão termoluminescente do topázio, proveniente de Carai, MG, após ser submetido a diferentes doses de radiação. O topázio é um fluorsilicato que se parece ao quartzo, entretanto possui maior dureza. Pequenas rochas do mineral foram pulverizadas, sendo aproveitado o pó com diâmetro entre 0,075 mm e 0.149 mm. Uma parte das amostras recebeu tratamento térmico a 400°C por uma hora para a limpeza da dose natural, em seguida foram irradiadas com radiação gama de ⁶⁰Co. Das emissões termoluminescentes das amostras observamos que: i) as amostras virgens apresentam dois picos, em 150 e 300°C; ii) amostras virgens mais dose adicional apresentam um novo pico a 80°C; iii) amostras tratadas e em seguida irradiadas apresentam três picos em 80, 150 e 180°C. iv) as curvas de calibração mostram que há um crescimento dos picos com a dose, possivelmente não linear. Desses resultados podemos concluir que: i) o material apresenta quatro picos com quatro centros de armadilhamentos, possivelmente associados a quatro defeitos no material; ii) tratamentos térmicos podem modificar a distribuição dos defeitos no material; iii) os espectros de emissão das amostras virgem mais dose adicional e tratada mais dose adicional demonstram que as recombinações devem acontecer da mesma forma. Foram feitos também decaimentos isotérmicos a várias temperaturas.

**ESTUDO DA EVOLUÇÃO ESTRUTURAL
DE CERÂMICAS MAGNÉTICAS OBTIDAS
POR COPRECIPITAÇÃO**

PASSOS, A. C.; SILVA, A. C. L.; VALENTE, G. C.;
MACEDO, C. V.; MOHALLEM, N. D. S.
UFMG

Ferritas são cerâmicas magnéticas importantes na fabricação de componentes eletrônicos, que requerem alta densidade, baixa porosidade e microestrutura controlada. Na tentativa de se obter materiais com características cada vez melhores, vários processos vem sendo

desenvolvidos, com variações nos tipos de precursores e nas rotas utilizadas, a fim de substituir com vantagens o método convencional. Nesse trabalho, pós cerâmicos de ferritas NiZn foram sintetizados via úmida e caracterizados por técnicas de difração e fluorescência de Raios X, absorção atômica e BET. Estudamos a influência de parâmetros tais como concentração e estequiometria da solução precursora e temperatura de tratamento térmico na estrutura e nas propriedades magnéticas dos pós.

METAIS E MATERIAIS MAGNÉTICOS

Metais e Materiais Magnéticos I (MMM) - 08/06/94

MAGNETISMO DO SISTEMA (FeOCl - AMINAS)

MEDEIROS, S. M. DE
UFMG

OLIVEIRA, J. C. P. DE; MENDES FILHO, J.
UFC

MACHADO, F. L. A.
UFPE

ALVES, O. L.
Unicamp

Os compostos resultantes da reação de intercalação da trietilamina, n-butilamina e da benzilamina em FeOCl foram caracterizados por difração de raios-X, medidas de susceptibilidade magnética AC e espectroscopia Mössbauer. A intercalação das aminas nos gaps de van der Waals da matriz de FeOCl ocasiona uma expansão significativa da distância interlamelar, a distância b . Dos resultados das medidas de susceptibilidade magnética AC tem-se que a transição magnética da matriz de FeOCl e de FeOCl(n-butil), é para-antiferromagnética, e para-ferromagnética no composto FeOCl(trietil). Da espectroscopia Mössbauer conclui-se que todas as amostras apresentam efeito de textura e tratam-se de Fe^{3+} -alto spin, em simetria octaédrica. As variações observadas nos parâmetros hiperfinos Mössbauer são consistentes com a transferência de carga do intercalante para as lamelas da matriz hospedeira. A intercalação das aminas entre as lamelas do FeOCl modifica a sua estrutura magnética. Os valores de campos hiperfinos magnéticos atribuídos ao novo sítio de ferro dos compostos intercalados são maiores do que o correspondente da matriz, enfatizando a diminuição do caráter covalente das ligações químicas. Esta suposição reforça o argumento de que ocorre a transferência de carga para a lamela da matriz. O sinal do GCE depende da amina intercalada. É negativo para os compostos FeOCl(n-butil) e FeOCl(benzil), semelhantemente à matriz de FeOCl, e positivo no FeOCl(trietil).

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS INTRÍNSECAS E COMPORTAMENTO CRÍTICO DA LIGA METÁLICA Fe_xAl_{1-x}

MORENO, N. O.; MONTENEGRO, F. C.

Departamento de Física - UFPE, 50670-901 Recife PE

Serão apresentados resultados de medidas de magnetização, em função do campo magnético externo e da

temperatura, para a liga magnética metálica desordenada Fe_xAl_{1-x} em diversas concentrações de Al. As medidas foram realizadas em altas temperaturas e campos uniformes baixos usando um magnetômetro de amostra vibrante. As temperaturas de ordenamento magnético são determinadas para cada valor de x , e os expoentes críticos β , γ e δ são comparados com os previstos pelo método de campo médio. Mostraremos ainda a evolução dos laços de histerese a medida que nos aproximamos da temperatura de Curie. A taxa de variação do momento magnético com a concentração de alumínio é avaliada a partir da variação da magnetização de saturação com a temperatura.

Dynamical Relaxation of the Domain State in the d=2 Random Field Ising Model

KONZEN, F.; LEITÃO, U. A.

Dep. Física, Universidade Federal de Minas Gerais,
E-MAIL LEITAO@BRUFMG.BITNET

NOWAK, U.

Universität Duisburg, Germany

Since it was established that the long range order (LRO) in the d=2 Ising Model (IM) is destroyed by Random Fields (RF), this system has not received much attention in the literature. However it should be very interesting to understand the new dynamical behavior arising in this domain state, due to the fluctuation of the non-percolating clusters and droplets. The principal aim of this work is to study some thermodynamic quantities, like internal energy E , staggered M_s , and homogeneous magnetization m , as well as its dynamical relaxation in the d=2 RFIM, using Monte Carlo Simulations in the DAFF systems. Some important experimental findings, like remanent magnetization and irreversibilities^[1], are reproduced in these simulations. We present and discuss the observed phase diagram. Very surprisingly, the non-exponential relaxation of the M_s under applied RF is nicely fitted by the generalized power law

$$M_s(t) = A \exp[-B(\log(t))^k]$$

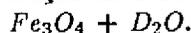
yielding $k \sim 2$. We guess that this fact is a dynamical signature of a "Griffiths Phase", as previously predicted by Randeria et. al^[2].

Financial support from FAPEMIG, CNPq and FINEP is gratefully acknowledged.

[1] U. A. Leitão, W. Kleemann and I. B. Ferreira; Phys. Rev. **B38** (1988) 4765.

[2] M. Randeria, J. P. Sethna and R. G. Palmer; Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 1321.

Caracterização cristalina e magnética de precipitados de magnetita obtidos na preparação do ferrofluido



RODRIGUES, K. C.; PARENTE, C. B. R.; MAZZOCCHI, V. L.

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN/SP

ROCCATTO, A.; GAMA, S.; CARDOSO, L. P. IFGW-UNICAMP.

Amostras de ferrofluido, à base de magnetita Fe_3O_4 , que tem estrutura magnética do tipo Néel A-B, foram desenvolvidas tendo como líquido portador água pesada, visando o estudo do espalhamento magnético dessas amostras com técnicas de difração de nêutrons. Durante a preparação deste ferrofluido podemos destacar três fases distintas. A primeira é a obtenção do precipitado de magnetita através de uma reação química entre cloretos férrico e ferroso sob a ação do hidróxido de amônio. A segunda é a surfactação das partículas de magnetita com o ácido dodecanóico. A terceira consiste na dispersão das partículas surfactadas em água pesada. Técnicas diferenciadas foram utilizadas na primeira fase de preparação do ferrofluido, ou seja na obtenção dos precipitados de magnetita. A técnica usual consiste na precipitação com a solução na temperatura ambiente. Neste trabalho, esta técnica foi modificada com a aplicação de um campo magnético (~ 1 kOe) sobre a solução e com o controle da temperatura, durante a precipitação. A caracterização cristalina e magnética das partículas precipitadas foi feita utilizando difração de nêutrons, difração de raios-X, microscopia eletrônica e medições de magnetização. Como resultados principais pode-se citar aqueles obtidos para os precipitados cujo método de preparação envolveu a aplicação de campo magnético e resfriamento da solução. Os precipitados, neste caso, apresentaram os valores mais diferenciados em comparação àqueles obtidos pelo método usual. Foram observados aumentos nos tamanhos médios das partículas de 120 Å para 161 Å e de 71,6 Å para 103,7 Å, utilizando difração de raios-X e microscopia eletrônica, respectivamente. Na magnetização de saturação observou-se um aumento de 72,57 emu/g para 77,01 emu/g. Estes resultados refletem-se diretamente nas características dos ferrofluidos, atribuindo-lhes melhor estabilidade e fluidez quando sob a ação de campos magnéticos.

WARVICKITAS DE TITÂNIO: UMA NOVA FAMÍLIA DE SISTEMAS MAGNÉTICOS UNIDIMENSIONAIS

FERNANDES, J. C.; GUIMARÃES, R. B.; CONTINENTINO, M. A.

UFF

BORGES, H.

PUC-RJ

Neste trabalho apresentamos resultados de difratometria de raios x e medidas de susceptibilidade magnética dinâmica em Boratos de Titânio (*Ti*) e Escândio (*Sc*) com fórmulas químicas $MgScOBO_3$, $MgTiOBO_3$ e $CaTiOBO_3$. Estes sistemas se cristalizam na estrutura da Warvickita. As Warvickitas de Titânio são magnéticas já que o *Ti* se encontra no estado de valência Ti^{+++} e portanto com configuração eletrônica $3d^1$. A estrutura da Warvickita, se caracteriza pela existência de *filas*, ao longo do eixo *c*, nas quais se localizam os ions de metal de transição. Levando em conta esta estrutura peculiar e os resultados das medidas de susceptibilidade magnética AC que apresentam um comportamento característico, do tipo $\chi(T) \propto T^{-\alpha}$ a baixas temperaturas, podemos identificar as Warvickitas de *Ti* como uma nova família de sistemas magnéticos unidimensionais desordenados, de Heisenberg, com interações antiferromagnéticas. É importante ressaltar que este comportamento, com o melhor do nosso conhecimento, havia sido observado apenas em complexos orgânicos baseados no *TCNQ*.

SPECIFIC HEAT MEASUREMENTS ON $(Nd_{1-x}Sm_x)_2CuO_4$ IN APPLIED MAGNETIC FIELDS^[1]

BARBETA^[2], V. B.; ALLENSPACH, P.; MAPLE, M. B. *Institute for Pure and Applied Physical Sciences, UCSD, La Jolla, CA 92093-0075, USA.*

JARDIM, R. F.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516, 01452-990, São Paulo, Brazil.

Low temperature specific heat measurements were performed on polycrystalline samples of $(Nd_{1-x}Sm_x)_2CuO_4$. All samples show an anomaly at low temperatures characterized by a maximum in the specific heat as previously reported for the pure compounds, which has been associated with a transition to an ordered state of the rare earth ion. The results at zero field show that there are two different mechanisms involved in the rare earth ordering process in the mixed compounds. For Sm concentrations $x > 0.8$, the transition is sharp and the temperature of the maximum (T_{max}) decreases linearly with increasing Nd. For Sm concentrations $x < 0.8$, T_{max} still decreases linearly with increasing Nd, but at a lower rate and the transition is broader. Measurements on these samples in applied magnetic fields reveal that T_{max} decreases slightly with increasing field for Sm-rich samples and increases for Nd-rich samples.

[1]Work at UCSD was supported by the U.S. DOE under grant No. DE-FG03-86ER45230.

[2]On a CNPq (Brazil) fellowship. Current address: Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 20516, 01452-990, São Paulo, Brazil.

**COMPORTAMENTO TÉRMICO E
MAGNÉTICO DE LIGAS Co - Fe - Si - B
AMORFAS**

SOUZA, M. DE F. Q. DE; LIMA, S. J. G. DE;
MENEZES, A. S. C. DE

Departamento de Tecnologia Mecânica-CT-UFPB

MACHADO, F. L. DE A.

Departamento de Física-UFPE

Ligas $(\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x)_{72.5}\text{Si}_{12.5}\text{B}_{15}$ ($0 \leq x \leq 0.06$), previamente preparadas em fornos de indução magnética, sob atmosfera de argônio, foram amorfizadas nas formas de fitas e fios, respectivamente pelos processos "Melt-Spinning" e IROWASP (In-Rotating-Water-Spinning-Process). As Análises Térmicas Diferenciais (ATD) destas ligas revelam que todas as composições estudadas cristalizam em duas etapas, independentemente da forma do fio ou fita. Entretanto, a cristalização dos fios ocorre, sistematicamente, em temperaturas inferiores às das fitas de composição correspondentes. Foram determinados os campos coercitivos (H_c) das fitas e fios à partir das curvas de susceptibilidade AC, obtidas em um sistema automático de levantamento das mesmas usando-se um Susceptômetro contruído no DTM/CT-UFPB em colaboração com o Departamento de Física da UFPE. Os resultados mostram que H_c parece passar por um mínimo quando $0.015 \leq x \leq 0.03$, tanto para fios como para as fitas.

**ESTUDO DE SUSCEPTIBILIDADE EM
LIGAS BINÁRIAS DE TERRA RARA**

OLZON-DIONYSIO, M.; SOUZA, S. D.

DF/UFSCar

SOUZA, R. R. DE; MAGON, C. J.

IFQSC/USP

Estamos realizando um estudo sistemático de propriedades magnéticas em ligas binárias de Terra Rara-Índio. Estas ligas são muito oxidáveis, o que se constitui em uma grande dificuldade para o desenvolvimento do trabalho. Foram preparadas as ligas de Tb_2In , Tb_3In_5 e TbIn . Resultados anteriores para a liga TbIn apresentam discrepância na literatura existente (1,2). Na preparação das amostras, quantidades estequiométricas dos elementos constituintes foram fundidas em forno de arco voltaico, em atmosfera de argônio e depois encapsuladas em tubo de quartzo, a fim de serem efetuadas medidas de susceptibilidade magnética em função da temperatura (4,2k a 300K), utilizando um susceptômetro AC(3). As medidas que estamos realizando, objetivam estudar o comportamento magnético destas amostras, em particular, determinar o momento magnético efetivo e a temperatura de Curie nos compostos com ordenamento magnético. Após essas medidas, as amostras deverão ser pulverizadas para medidas de difração de raio-x. Apresentaremos os resultados obtidos.

(1) J. W. Cable, W. C. Koehler and E. O. Wollan - Phys. Rev. 136 n. 1a, (1964), 240-2

(2) P. Lethuiller and A. Percheron - Guegan - J. Less - Common Metals 46, (1976), 85 - 9

(3) R. R. Souza, C. J. Magon - Susceptômetro para medidas automáticas da susceptibilidade magnética AC - XV ENFMC - Caxambu, 1992.

*Metais e Materiais Magnéticos II
(MMM) - 08/06/94*

**Textura Cristalográfica e Remanência de ímas
de SmCo_5 .**

MACHADO, R.; CAMPOS, M. F. DE

EPUSP

LANDGRAF, F. J. G.

IPT

MISSELL, F. P.

IFUSP

A magnetização de saturação (M_s) de um ímã depende da magnetização intrínseca e da fração volumétrica das fases presentes na microestrutura. Um dos índices de mérito dos ímãs, a remanência magnética (M_r), depende da magnetização de saturação e da textura cristalográfica do material. A maximização da remanência é obtida, durante o processo de fabricação dos ímãs, pela rotação de partículas monocristalinas sob o efeito do campo magnético externo. Quanto maior o campo aplicado, maior a tendência das direções $\langle 0001 \rangle$ dos cristais alinharem-se paralelamente à direção do campo externo. Neste trabalho foram obtidas texturas cristalográficas de diferentes ímãs de SmCo_5 através de figuras de pólo de Schulz e de difratogramas de raios-X. Combinando esses resultados com a análise microestrutural foi possível estimar a razão M_r/M_s e compará-la com valores experimentais obtidos através da curva de histerese desses ímãs.

**Microstructure of Invar Fe_3Pt , as studied by
TEM and FIM/AP**

WELZEL-GERTH, S.

HMI

Near stoichiometric alloys show magneto-volume instabilities. This effect is pronounced in disordered $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$. The possible role of chemical inhomogeneities is investigated by means of transmission electron microscopy (TEM) and field-ion microscopy combined with atom probe analysis (FIM/AP).

The atom probe data from both ordered and disordered $\text{Fe}_{72}\text{Pt}_{28}$ are interpreted statistically by methods based on time series analysis. The aim is to investigate whether clustering of Fe occurs in the disordered or in an

ordered state. An estimation of a local ordering parameter ω is given.

The density of antiphase boundaries (APB's) in various ordered alloys is evaluated from TEM pictures.

The presence of γ -Fe is discussed in relation with clustering and non-conservative APB's.

EFEITO DE TRATAMENTOS TÉRMICOS E DA COMPOSIÇÃO NAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E MICROESTRUTURAIS DE LIGAS Nd-(20-x)%Fe-x%Al-5%B (x=0 - 11) (% atômica)

POLITANO, R.; ISEJIMA, M. E.; MISSELL, F. P.
Universidade de São Paulo

As amostras brutas de fusão apresentaram boreto primário, Nd, a fase metaestável A_1 e em nas amostras com teores maiores de Al, Nd_3Al . Os valores do Campo Coercivo H_c e da Temperatura de Curie T_c decrescem com o aumento dos teores de Al. Os valores de T_c variam de 518 K para x=0 até 430 K para x = 11. O comportamento $T_c(x)$ é semelhante ao encontrado para ligas terárias Nd-Fe-Al de mesma composição, entretanto com valores de T_c maiores. A microestrutura varia de maneira significativa com a composição, passando do eutético fino encontrado para x=0, sendo que o mesmo sofre um engrossamento de suas lamelas conforme o aumento dos teores em Al. Foram feitos tratamentos térmicos a 1123 K, 1173 K, 1223 K e 1323 K. Os tratamentos foram feitos por 15 minutos. O tratamento a 1173 K foi feito em outros tempos (0,5, 1, 2, 3 e 4 horas). Os valores de magnetização remanente e de saturação sofreram um decréscimo tanto com a temperatura de tratamento como com o tempo. Nas ligas com teores de Al maiores que 6%at. não apresentam mais traços de fase ferromagnética após tratamentos feitos a 1123 e 1223 K a 15 minutos e para tratamentos feitos a 1173 K por 4 h. Para teores menores de Al, a fase A_1 estabiliza-se, transformando-se na fase estável μ , presente no sistema Nd-Fe-Al. A microestrutura desta fase de lamelar passa a acicular. Para teores maiores em Al, a microestrutura sofre um engrossamento gradativo.

MAGNETISMO DOS SISTEMAS INTERMETÁLICOS $Nd(Ni_{1-x}Cu_x)_5$.

BARTHEM, V. M. T. S.; NOVAK, M. A.
UFRJ
CUNHA, S. F. DA
CBPF

Amostras de $Nd(Ni_{1-x}Cu_x)_5$, com concentrações que variam entre $x = 0$ e 1, foram investigadas a partir da análise das medidas de magnetização, susceptibilidade e calor específico. A introdução de 20% de Ni em $NdCu_5$ acarreta uma brusca redução da magnetização espontânea, M_s , e impede que ocorra a mudança na direção de fácil magnetização observada no $NdCu_5$. A

pequena diferença entre a magnetização espontânea à baixas temperaturas deve-se ao fato que para $T \leq 5k$, $NdCu_5$ possui direção de fácil magnetização, como o $NdNi_5$, perpendicular ao eixo c mais não possui a pequena contribuição negativa do Ni. A concentração de elétrons de condução possui um máximo em torno de $x = .2$ bem menor que em $x = 1$ e o mínimo em torno de $x = .6$. O composto com $x = .4$ apresenta uma transição metamagnética com um pequeno campo crítico.

CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS DE PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E HIPERFINAS DO Fe FCC

GUENZBURGER, D.

CBPF/CNPq

ELLIS, D.

Northwestern University

O Fe metálico com estrutura cristalina FCC é um sistema muito interessante, e pode ser obtido como precipitados de tamanhos variáveis em matrizes de Cu ou ligas de Cu (W. Keune, T. Ezawa, W.A.A. Macedo, U. Glos, K. P. Schletz e U. Kirschbaum, *Physica B*, 161, 269 (1989)). Cálculos de bandas de primeiros princípios revelaram vários estados magnéticos de energias próximas: antiferromagnético, ferromagnético de baixo spin e ferromagnético de alto spin (C.S.Wang, B.M.Klein e H. Krakauer, *Phys. Rev. Letters* 54, 1852 (1985)). O estado magnético do Fe FCC depende crucialmente das distâncias interatômicas. Neste trabalho, reportamos cálculos de primeiros princípios na teoria do funcional da densidade para um aglomerado de 62 átomos de forma cúbica, representando o Fe FCC. O potencial cristalino externo é incluído, e a simetria de translação correta é considerada no Hamiltoniano. O método utilizado é o Variacional Discreto (D.E.Ellis e G.S.Painter, *Phys.Rev.B* 2, 2887 (1970)). São obtidos momentos magnéticos e campos hiperfinos nos estados anti e ferromagnéticos, e sua variação com o parâmetro de rede é investigada.

EFEITOS DA ORDEM DE CURTO ALCANCE NA DENSIDADE DE ESTADOS ELETRÔNICOS DE UMA LIGA BINÁRIA DESORDENADA NO LIMITE BIDIMENSIONAL

MELLO, D. F. DE

Depto. de Física - Fac. de Ciências - Unesp - Campus de Bauru

CABRERA, G. G.

IFGW - Unicamp

Efeitos da Ordem de Curto Alcance são incluídos no cálculo da Densidade de Estados Eletrônicos (DOS) de uma liga binária desordenada quase bidimensional

através do Parâmetro de Cowley, generalizando o procedimento do caso unidimensional. A variação deste parâmetro permite interpolar continuamente desde o regime segregado até o caso ordenado, sendo a desordem completamente aleatória um caso particular. A DOS no limite bidimensional é obtida através de cálculos para "faixas" de largura M e comprimento N , com $N \gg M$, sendo M igual o número de cadeias lineares acopladas e N o comprimento de cada cadeia, observando-se a convergência quando M cresce, de maneira análoga às técnicas de "Finite-Size Scaling". A faixa é aproximada por M novas cadeias lineares desordenadas desacopladas com energias renormalizadas. O sistema é descrito por um Hamiltoniano tipo Tight-Binding com "hopping" entre sítios primeiros vizinhos, incluindo apenas desordem diagonal (no caso de uma liga binária, a autoenergia do sítio pode assumir somente dois valores). Resolvemos o caso que corresponde ao chamado "Quantum Site Percolation Model", onde as duas autoenergias possíveis estão muito separadas, sendo sua diferença muito maior em valor absoluto que o valor típico da largura da banda. A DOS de uma cadeia linear é obtida numericamente pelo método do "Negative Factor Counting". Sugerimos um método para melhorar a aproximação, incluindo progressivamente correlações de ordem mais alta que as descritas pelo Parâmetro de Cowley.

se comporta como um líquido de Fermi mesmo após o desaparecimento do *gap*. Finalmente, em abordagens que utilizam um *mapping* do modelo de Hubbard num modelo de Anderson, no limite de infinitas dimensões, a densidade de estados apresenta uma estrutura de três picos: dois picos laterais, que darão origem às sub-bandas de Hubbard, e um pico central, remanescente da situação não interagente, que desaparece abruptamente na transição metal-isolante. Nos primeiros trabalhos que propuseram o *mapping* Hubbard-Anderson conjecturava-se que o pico central pudesse ser um subproduto indesejado das aproximações utilizadas. Mais recentemente, a existência desse pico tem sido defendida como uma característica do modelo. O esclarecimento dessa controvérsia, bem como a obtenção de uma transição isolante-metal a partir do limite atômico são as principais motivações deste trabalho. Para tanto, calculamos densidades de estado via funções de Green, utilizando um tratamento perturbativo em torno do limite atômico no modelo de Hubbard e um tratamento similar da hibridização no modelo de Anderson correspondente.

POLARIZAÇÃO DE SPIN RKKY EM SITUAÇÕES INHOMOGÊNEAS

HELMAN, J. S.; BALTENSPERGER, W.

CBPF

Sistemas Correlacionados (MMM) -
08/06/94

SOBRE A FORMA DA DENSIDADE DE ESTADOS NO MODELO DE HUBBARD

CRACO, L.; GUSMÃO, M. A. C.

UFRGS

Diferentes abordagens para a solução do hamiltoniano de Hubbard têm levado a resultados conflitantes. A região de difícil tratamento corresponde à interação coulombiana (U) intermediária ou fraca, na situação de banda semi-preenchida. No limite de interação forte há consenso sobre a forma qualitativa da densidade de estados de uma partícula, que apresenta duas sub-bandas separadas por um *gap* de correlação. Quando U é reduzido, as duas sub-bandas se aproximam e espera-se que, não considerando a presença de ordem magnética, o *gap* de correlação desapareça para algum valor crítico de U (transição isolante-metal), com a densidade de estados se aproximando da estrutura de banda única do caso não interagente. Entretanto, em algumas abordagens, como a aproximação Hubbard I, esse *gap* só desaparece em $U = 0$. Em outras, como a aproximação Hubbard III, existe um valor crítico de U , mas o sistema não

A polarização de spin induzida por um campo pontual num gaz de elétrons, chamada polarização RKKY, é responsável pela interação entre spins em metais. Existe uma expressão analítica famosa válida para sistemas homogêneos. A interpretação de resultados experimentais referentes à interação entre camadas magnéticas exige um tratamento da interação RKKY em sistemas inhomogêneos. Esse trabalho apresenta resultados exatos para o semi-espaco e para camadas em três dimensões, e para condutores unidimensionais semi-infinitos e finitos. A densidade dos elétrons é zero na superfície. No semi-espaco em três ou uma dimensão a polarização consiste de três termos. O primeiro é a expressão usual em torno do campo pontual. O segundo é uma expressão igual em torno do ponto imagem do campo. Na superfície esses dois termos se somam com o mesmo valor. O terceiro termo depende da soma das distancias para o campo e a imagem do campo, e ele cancela os dois outros termos na superfície. Uma outra forma de inhomogenidade que foi considerada é a existência de um potencial dentro de um espaco ilimitado. Resultados exatos foram obtidos para um potencial livre de reflexões num espaco unidimensional. Um método aproximado que usa ideas de Thomas-Fermi foi sugerido. Neste caso ele compara favoravelmente com o resultado exato.

SOBRE A NATUREZA DO ESTADO ISOLANTE NO MODELO DE HUBBARD DE TRÊS BANDAS

BEATRICI, A.; GUSMÃO, M. A. C.
UFRGS

As principais interações eletrônicas existentes nos planos de Cobre-Oxigênio (CuO_2) dos supercondutores de alta temperatura crítica são descritas pelo hamiltoniano de Hubbard de três bandas, correspondentes aos orbitais $3d_{x^2-y^2}$ do Cobre e $2p_{x,y}$ do Oxigênio. São levadas em conta interações Coulombianas locais distintas para cada tipo de sítio da rede ($U_d \neq U_p$), bem como hibridizações $d-p$ (Cobre-Oxigênio) e $p-p$ (Oxigênio-Oxigênio). Em nossa abordagem, a parte local do hamiltoniano é resolvida exatamente, enquanto os termos de *hopping* são tratados como perturbação para o cálculo de funções de Green a temperatura finita. Com isto obtemos densidades de estados de uma partícula, restringindo-nos à aproximação mais simples, equivalente à aproximação Hubbard I para o modelo de uma banda. Embora no limite atômico o sistema seja um isolante por transferência de carga, a hibridização $d-p$ aumenta o peso espectral da sub-banda de mais baixa energia, dando origem a uma fase metálica no caso paramagnético. Entretanto, uma solução antiferromagnética é obtida para um intervalo de valores da concentração de lacunas que contém a situação estequiométrica, sendo assimétrico com relação a dopagem com elétrons ou lacunas, em concordância com resultados experimentais. Na região de estabilidade da fase antiferromagnética, um gap do tipo Slater se abre em torno da energia de Fermi, dando origem a um estado isolante. Discutimos as diferenças entre nossa descrição e outras abordagens teóricas, bem como sua adequação às informações obtidas de dados experimentais.

CORRELAÇÕES MAGNÉTICAS ENTRE IMPUREZAS DE ANDERSON EM SISTEMAS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

RUPPENTHAL, A. R.; GUSMÃO, M. A. C.
UFRGS

Dentro da área geral de estudo das propriedades magnéticas de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados destaca-se a análise dos assim chamados *sistemas de férmions pesados*, que apresentam, como principal característica, a coexistência de momentos magnéticos localizados e elétrons de condução. A multiplicidade de possíveis comportamentos desses sistemas a baixas temperaturas é em geral atribuída à competição entre dois mecanismos antagônicos: a interação RKKY, que tende a estabelecer uma ordem entre momentos magnéticos locais via polarização dos elétrons de condução, e o efeito Kondo, ou seja, a blindagem destes momentos locais pelos mesmos elétrons

de condução. Acredita-se que os aspectos básicos da física desses sistemas estejam presentes no problema simplificado de duas impurezas magnéticas numa matriz metálica, descritas pelo modelo de Anderson. No presente trabalho utilizamos uma abordagem do tipo *tight-binding* para esse problema, através de uma expansão perturbativa em torno do limite atômico para o cálculo de funções de correlação de spins. A restrição a uma ou duas dimensões espaciais, embora facilite os cálculos numéricos, introduz aspectos novos, decorrentes das possíveis instabilidades do gás de elétrons frente à formação de ondas de densidade de spin. Estas instabilidades dão origem a fortes correlações de spin não associadas à presença das impurezas magnéticas. Discutimos a importância relativa dos diferentes mecanismos de correlação e sua relevância na análise do comportamento desse tipo de sistemas em baixa dimensionalidade, com possíveis implicações para a interpretação de resultados de simulação numérica ou diagonalização exata em clusters finitos.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SISTEMA PSEUDOBINÁRIO $(\text{Mn}_{1-x}\text{Nb}_x)\text{Fe}_2$.

OLIVEIRA FILHO, J. E. C. DE; PADUANI, C.
UFSC

A fase de Laves NbFe_2 (fase ϵ) tem a estrutura cristalina hexagonal do MgZn_2 , e é um antiferromagneto fraco com uma temperatura de Néel de cerca de 10K. A substituição de átomos Nb por átomos Zr causa ferromagnetismo e antiferromagnetismo neste composto, para $x \leq 0.4$ e $0.4 < x \leq 0.5$, respectivamente, sendo paramagnético para $x > 0.5$. Neste trabalho investigamos o efeito da substituição de átomos Nb por átomos Mn na fase ϵ , que é estável entre cerca de 34 e 42 % at. Nb . As amostras das ligas foram preparadas por fusão à arco dos componentes puros em atmosfera de argônio. A estrutura cristalina das ligas é analisada por difração de raios-X e as propriedades magnéticas hiperfinas determinadas com o efeito Mössbauer.

A SLAVE BOSON TREATMENT FOR KONDO INSULATORS : TWO-BAND MODEL.

LEAL, C. E.
INPE/LAS
TROPER, A.
CBPF

We study a hybridized two band model in the framework of a slave boson mean field theory to describe Kondo insulator systems. One of the bands is a flat and uncorrelated s like one whereas the other is a narrow f character one with infinite on site Coulomb correlation. We develop a systematic approximation scheme based on a canonical transformation in order to elimi-

nate f double occupancy giving rise to a t - J like model containing aspects connected with the metal insulator transition as well as magnetic correlations. Here we concentrate our study on the physics of localization and delocalization of states via bosonization and we derive a critical value V_c for the hybridization gap which defines the metal-insulator transition in these systems. The critical hybridization term depends on the one electron mixing as well as on the d - f Coulomb correlation.

FERMI SURFACE INSTABILITIES AND MAGNETIC BREAKDOWN IN A QUASI-TWO-DIMENSIONAL ORGANIC CONDUCTOR

GUSMÃO, M. A. C.

UFRGS

ZIMAN, T.

CNRS-Université Paul Sabatier, Toulouse, France

The quasi-two-dimensional conductors of the family $(\text{BEDT} - \text{TTF})_2\text{MHg}(\text{SCN})_4$ ($M = \text{K}, \text{Rb}, \text{Tl}, \text{NH}_4$, etc.) present interesting Fermi surface topology and low temperature magnetic properties. Starting from tight-binding parameters previously quoted, we reproduce the band structure of the planes of $\text{BEDT} - \text{TTF}$ molecules, which presents two branches of Fermi surface, one of them two-dimensional, and the other with a quasi-one-dimensional character. At high temperatures, Shubnikov-de Haas oscillations show a period compatible with the area of the two-dimensional branch. It has been claimed that at low temperatures an incommensurate spin density wave creates a gap throughout the entire nearly nested one-dimensional branch of the Fermi surface. In order to test this interpretation of the experimental results, we study the nesting properties of the Fermi surface, calculating the RPA susceptibility, and predict optimal nesting vectors. We discuss possible scenarios for the low temperature regime in the light of new Shubnikov-de Haas frequencies and anisotropy of the magnetoresistance observed in experiments. The appearance of magnetic breakdown is also discussed, both by semiclassical arguments and numerical solution of finite clusters.

Cálculo da Susceptibilidade Magnética do Modelo de Anderson de Duas Impurezas.

SILVA, J. B. DA

Universidade Estadual de Ponta Grossa

OLIVEIRA, L. N. DE

Universidade de São Paulo

Usando uma nova abordagem do método de Grupo de Renormalização Numérico (GRN), calculamos a susceptibilidade magnética e obtemos os diagramas de fluxo de energia do modelo de Anderson de duas impurezas simétrico, com correlação magnética entre elétrons no mesmo orbital de impureza. Nossa abordagem reduz o

tempo computacional e o erro implícito do GRN permitindo trabalhar com valores grandes do parâmetro Λ de discretização do método. Os diagramas de fluxos, obtidos para diferentes pontos do espaço de parâmetros, mostram os pontos fixos estáveis do modelo: efeito Kondo, com uma defasagem de $\pi/2$ no espectro de condução e acoplamento antiferromagnético entre spins das impurezas, onde nenhuma defasagem é observada. Um ponto fixo instável é observado na fronteira entre as regiões de domínio dos pontos fixos estáveis. Para acoplamento ferromagnético entre impurezas o gráfico da susceptibilidade a um efeito Kondo de dois estágios. Para acoplamento antiferromagnético a susceptibilidade cai rapidamente a zero com efeito da compensação dos spins das impurezas. No ponto fixo instável a susceptibilidade é nula.

ESTUDO DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS EM METAIS VIA MODELO DE ANDERSON

COSTA, S. C.; LÍBERO, V. L.

USP - IFQSC

O modelo de Anderson, proposto em 1961, tem sido bastante explorado no estudo da formação de momentos magnéticos localizados em metais. Nesse modelo, os elétrons localizados se acoplam com os da banda via um termo de hibridização e a correlação eletrônica é considerada através da repulsão coulombiana entre elétrons em um mesmo orbital. Nosso objetivo é estudar esse modelo através da técnica numérica de Grupo de Renormalização desenvolvida por Wilson para o modelo de Kondo (Rev. Mod. Phys., 47, 773(1975)). Nessa técnica, o metal é descrito por uma banda de condução logaritmicamente discretizada de forma a preservar a invariância das escalas de energia em torno do nível de Fermi. Em decorrência dessa discretização, os gráficos do calor específico ou da susceptibilidade, por exemplo, mostram pequenas oscilações indesejáveis. Procuraremos obter melhores resultados através da utilização da conservação da carga axial que foi descoberta recentemente no contexto do modelo de Kondo de duas impurezas (Phys. Rev. B, 40, 324(1989)).

Magnetismo de Intermetálicos de Terras-Raras Via Computação Algébrica

SOBRAL⁺, R. R.; GUIMARÃES⁺⁺, A. P.; SILVA, X.

A. DA

CBPF/CNPq

Do ponto de vista teórico, o magnetismo dos intermetálicos de terras-raras utiliza um modelo que leva em conta a descrição do Campo Cristalino (C.C.) (relativo ao íon trivalente de terra-rara) e da interação de troca efetiva entre os íons de terras-raras. Mesmo para simetrias cúbicas, a simples obtenção dos autovalores do C.C. é feita normalmente por métodos numéricos o

que dificulta a determinação dos parâmetros de C.C. e torna complexa a análise de grandezas magnéticas. Recentemente estudamos diversos aspectos do magnetismo de compostos RAI_2 ($R = Pr, Nd$ (R.R. Sobral, A.P. Guimarães e X.A. da Silva, *J. Phys.: Condens. Matter* 5 (1993) L671.)) usando computação algébrica, supondo sempre que a direção de magnetização fácil é (0,0,1). Neste trabalho vamos apresentar resultados analíticos de interesse magnético supondo que a direção de magnetização fácil possa ocorrer nas direções (1,0,0), (1,1,0), (1,1,1). Para cada uma destas direções obtemos uma expansão analítica até segunda ordem no parâmetro de campo magnético efetivo. Estes resultados são de interesse para o cálculo da temperatura crítica, susceptibilidade magnética e do valor inicial do momento magnético a baixa temperatura. Até a presente data, só há referências na literatura usando-se métodos numéricos na obtenção dessas expansões (G. Fischer e A. Herr, *Phys. Stat. Sol. (b)* 136 (1986) 103. idem (b) 133 (1986) 157.)⁺ bolsista RD do CNPq; ⁺⁺ atualmente no MIT, Cambridge MA 02139, USA.

Magnetic phase diagram of Cr-Fe-Co alloys.

GALKIN, V. Y.; CAMARGO, P. C. DE
UFFPR

Based on thermal expansion and resistivity data a magnetic phase diagram of $(Cr-1.5at\%Fe)_{1-x}Co_x$ alloy system has been constructed. The Neel temperature exhibits a sharp decrease at an incommensurate (I) phase and increase at a commensurate (C) phase. 0.4at%Co-doped alloy shows a first order step-like anomaly in the thermal expansion curve which is identified as the I-C phase transition. The I-C transition line has an anomalous positive slope, the same as in the binary $Cr_{1-x}Fe_x$ alloy system. A sharp decrease of the Neel temperature at the incommensurate magnetic phase is discussed in terms of a local decrease of the Fermi level with an increase of Co concentration and a huge scattering effect. The type of a thermal expansion anomaly in the vicinity of the Neel temperature in Cr-Fe based alloys is shown to be strongly dependent on a position of the Fermi level.

Método Generalizado do Grupo de Renormalização Numérico para o Cálculo de Propriedades Termodinâmicas de Impurezas em Metais

OLIVEIRA, W. DA C. DE
UFF-Instituto de Física
OLIVEIRA, L. N. DE

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

Este trabalho tem como objetivo desenvolver uma técnica de cálculo que permita diagonalizar Hamiltonianos de mais de uma impureza e adaptá-la ao cálculo de suas propriedades termodinâmicas. Esta técnica é uma

extensão do método de grupo de renormalização, originalmente desenvolvido por Wilson para calcular propriedades termodinâmicas do modelo Kondo de uma impureza. O procedimento baseia-se na discretização logarítmica da banda de condução do metal hospedeiro, definida por um parâmetro de discretização Λ , que permite que se projete o Hamiltoniano em uma base quântica finita, na qual o mesmo possa ser diagonalizado numericamente. O tempo do custo computacional do cálculo diminui exponencialmente à medida que Λ cresce, tornando melhor trabalharmos com valores grandes de Λ . O grande problema em usarmos Λ grande é que aparecem oscilações nas curvas das propriedades termodinâmicas. Neste trabalho apresentamos o método generalizado que elimina essas oscilações. Inicialmente, testamos o método no modelo de Anderson sem correlação, de uma impureza para o cálculo da susceptibilidade magnética do sistema, com resultado satisfatório. Na sequência, para verificar a potencialidade do método, diagonalizamos o Hamiltoniano de Falicov-Kimball-Ramirez (sem spin) do modelo de duas impurezas e calculamos a susceptibilidade de carga da impureza. A motivação para esse cálculo é a equivalência existente entre o Hamiltoniano de Falicov-Kimball-Ramirez e o Hamiltoniano Kondo, para o modelo de uma impureza. No caso de duas impurezas o nosso cálculo demonstra que a interação $RKKY$ destrói essa equivalência, ainda que qualitativamente as curvas da susceptibilidade de carga neste modelo reproduzem as de susceptibilidade magnética do modelo Kondo.

TWO-BAND MODEL FOR KONDO INSULATORS: THERMODYNAMIC AND SCALING PROPERTIES

CONTINENTINO, M. A.
UFF
JAPIASSÚ, G. M.
UFRJ
TROPER, A.
CBPF

A new family of heavy fermions has been discovered which is characterized by an insulating ground state^a. A typical representative of this family is the system, $Ce_3Bi_4Pt_3$. Similar behavior to these rare-earth materials has also been observed in some transition metal compounds like $FeSi$. We introduce a two-band model to describe the physical properties of these systems. Coulomb correlations in the narrow band are treated beyond the mean field approach. We find that a critical value of the hybridization is required to open a gap that produces an insulating ground state^b. This critical value depends on the ratio between the effective masses of the electrons in the large and narrow bands. The two-band model provides a unified description of the rare-earth and transition metal based systems. We discuss the scaling properties of these systems close to the criti-

cal value of hybridization. The temperature-dependent magnetic susceptibility calculated in our model is in good agreement with experimental results.

^aG. Aeppli and Z. Fisk, *Comments Cond. Mat. Phys.*, 16, 155 (1992).

^bM. A. Continentino, G. M. Japiassú, and A. Troper, *Phys. Rev. B* 49, 4432, (1994).

INSTABILIDADES MAGNÉTICAS EM ISOLANTES DE KONDO

CONTINENTINO, M. A.

UFF

JAPIASSU, G. M.

UFRJ

TROPER, A.

CBPF

Em artigos recentes mostramos que dentro de um modelo de duas bandas um estado isolante de Kondo pode ser obtido, para uma contagem particular de elétrons por sítio, quando a hibridização V entre as bandas assume um valor maior que um determinado valor crítico V_c (M.A.Continentino, G.M.Japiassu and A. Troper, *Phys.Rev.B* a ser publicado; *ibid J.Appl.Phys.* a ser publicado). As bandas consideradas são: uma larga do tipo s e outra estreita associada com elétrons do tipo d ou f , características do sistema $FeSi$ ou de compostos contendo Ce ou U que constituem a família dos isolantes de Kondo. A hibridização que nos referimos acima é efetiva sendo renormalizada por efeito de muitos corpos na banda estreita de elétrons fortemente correlacionados, os quais tratamos em diferentes aproximações (Hubbard I e Hartree-Fock). Neste trabalho investigamos a possibilidade de instabilidades magnéticas ocorrerem no estado metálico precursor da transição metal-isolante. Isto é feito através de uma análise da densidade de estados para V próximo de V_c . Uma comparação com resultados experimentais é apresentada.

Polaritons confinados em fios coaxiais magnéticos.

VASCONCELOS, E. F.; FARIAS, G. DE A.; ALMEIDA, M. P. DE

UFC

ALMEIDA, N. S. DE

UFRN

Neste trabalho consideramos a propagação de polaritons em um fio coaxial. Para isso calculamos a relação de dispersão, tanto para os modos superficiais como para os modos confinados. O estudo dessa propagação permite-nos investigar o efeito de uma superfície cilíndrica sobre as propriedades desses modos eletromagnéticos mistos que são chamados polaritons,

considerando que o material onde eles se propagam apresenta anisotropia uniaxial. O sistema considerado neste estudo é um longo cilindro coaxial com eixo paralelo à direção da anisotropia. O cilindro tem raios a e b ($0 \leq a \leq b$), e está envolvido por um meio infinito, isotrópico e não magnético. A geometria do cilindro define duas regiões. Região I: $0 \leq r \leq a$ e região II: $a \leq r \leq b$. A região I tem as mesmas características do meio que envolve o cilindro. Para a região II nós admitimos que os tensores permeabilidade magnética e função dielétrica são dados, em coordenadas cartesianas, por:

$$\mu_{II} = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_1 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_2 \end{pmatrix}$$

e

$$\epsilon_{II} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix}$$

Vamos considerar o caso em que a dependência com a frequência dever-se-á apenas aos elementos não nulos do tensor permeabilidade magnética, sendo os termos ϵ_1 e ϵ_2 constantes. Devido à simetria do problema trabalhamos com coordenadas cilíndricas para resolver as equações de Maxwell, obtendo assim a relação de dispersão usando as condições de contorno usuais, i.e., admitindo a continuidade dos campos eletromagnéticos nas interfaces do cilindro. Aplicações numéricas são feitas para o $M_n F_2$, que é um anti-ferromagneto uniaxial de Heisenberg descrito pelo modelo de duas sub-redes. Os casos limites são estudados para comparação com um cilindro simples, i.e., não coaxial, e para o caso de um cilindro isotrópico, checando assim os nossos resultados.

The Peierls-Hubbard Model: A Hubbard-I, Adiabatic Scheme

STEIN-BARANA, A. C. M.; LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

Our starting point is a Generalized Mean Field Approach to the Peierls-Hubbard Model. In the present work we restrict our calculations within the adiabatic scheme via the Hellmann-Feynman Theorem. As a preliminary step we consider the Hubbard-I solution (a good approximation for narrow band compounds), calculate the several normal ordered phases for a bipartite lattice and construct the phase diagram for this system under consideration. Within the approximations mentioned above all phases are insulating, and we probe the competition among the several Coulombic, Band and Phonon parameters to stabilize the several Spin or Charge Ordered Phases. The relevance of this calculation is two fold. First, it has not been done, and secondly, it seems to be an adequate link (for comparison purposes)

between existing Hartree-Fock (*HF*) solutions and self-consistent (beyond *HF*) non-adiabatic solutions. We plan to calculate the latter in a subsequent work.

An Exact Solution for an Extended Hubbard two-site two level System

STEIN-BARANA, A. C. M.; YOSHIDA, M.; LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

An exact solution for a Finite Extended-Hubbard System is presented. In particular we consider the simplest multilevel dimer (two-site, two-level), reducing the number of Coulombic and Hopping parameters, to what is believed to be the minimum relevant set of parameters describing a $Cu - O$ dimer. The latter is the backbone structure for studying cuprate oxides compounds. Such compounds exhibit diverse normal ordered phases (spin and/or charge) prior to their celebrated high T_c superconductive phase. Our goal is to probe the rôle of the several parameters in the stabilization of the diverse ordered phases. We exploit all the spin symmetries of the system, to further separate our system into dynamically decoupled subsystems. Furthermore we introduce small staggered magnetic and electric fields, a necessary symmetry breaking device for finite systems, in order to compute the diverse generalized susceptibilities.

CÁLCULO DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS PARA IMPUREZAS INTERSTICIAIS MAGNÉTICAS EM Yb FCC

MELLO, L. A. DE; FROTA-PESSÔA, S.
IFUSP

Recentemente investigamos o comportamento do Fe como impureza intersticial em Sc, Ti, Y e Zr na estrutura hcp. Embora em nenhum dos casos as impurezas apresentasse momento magnético local, este estudo sugere que devemos esperar formação de momento para o Fe como impureza em Yb. Neste trabalho, portanto, utilizamos, o RS-LMTO-ASA, para determinar a partir de primeiros princípios, dentro do formalismo funcional densidade local, a estrutura eletrônica ao redor de impurezas intersticiais de Fe, Mo, Cr e V em Yb. Nesse cálculo os elétrons 4f são tratados como caroço sendo o sistema, portanto, divalente. Colocamos a impureza no sítio intersticial octaédrico da estrutura Fcc. Como as impurezas intersticiais utilizadas possuem dimensões não desprezíveis em relação às do host Yb, usamos potenciais de pares do tipo Leonard-Jones, para determinar a relaxação da impureza e seus primeiros vizinhos na rede. Nossos resultados para momento magnético e interações hiperfinas são comparados com dados experimentais da literatura.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO SISTEMA INTERMETÁLICO $Ce(Fe_{1-x}Al_x)_2$ OBSERVADAS POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER NO LADO RICO EM Al.

PÉREZ, C. A. S.

IF-UFRJ

BAGGIO-SAITIVITCH, E.; CUNHA, S. F. DA
CBPF

A substituição de Al por Fe na região rica de Al do sistema de compostos intermetálicos $Ce(Fe_{1-x}Al_x)_2$ não apresenta um simples processo de diluição. Pelo contrário, se observa uma série de drásticas mudanças da complexa estrutura magnética do composto $CeAl_2$. Segundo o diagrama de fases magnéticas preliminar o sistema passa de um ordenamento antiferromagnético modulado e efeito Kondo a um fraco ferromagnetismo e logo a um ordenamento quasi-ferrimagnético conforme aumenta o conteúdo de Fe no sistema. Os espectros Mössbauer de ^{57}Fe tomados a temperatura ambiente são formados pela superposição de dois dubletos quadrupolares (A,B) com $QS(A) > QS(B)$; a 4.2 K a componente A mostra uma distribuição de campos magnéticos hiperfinos com valor médio do campo hiperfino (B_{hf}) de 10T. Medidas Mössbauer foram realizadas a diferentes temperaturas e com a aplicação de vários campos magnéticos externos. A variação da fração magnética A e dos valores do B_{hf} com a concentração são discutidos com base em medidas de magnetização realizadas nas mesmas amostras.

CÁLCULO DE MOMENTO MAGNÉTICO E DESLOCAMENTO ISOMÉRICO NO ENTORNO DE IMPUREZAS EM Fe (bcc)

TERRAZOS, L. A.; FROTA-PESSÔA, S.
Instituto de Física - USP

O método RS-LMTO-ASA tem sido utilizado com sucesso no estudo de estrutura eletrônica, magnetismo local e interações hiperfinas em hospedeiros metálicos não magnéticos ("Cu, Zr, Y, Sc, Mo, Ru, Ti etc..") [1,2] É interessante investigar o comportamento de impurezas em hospedeiros magnéticos para os quais, com excessão do trabalho de Akai et al [3] para o Fe, existem poucos estudos na literatura. Neste trabalho usamos o método RS-LMTO-ASA para determinar, a partir de primeiros princípios, a estrutura eletrônica para impurezas de Cu e de Si no Fe bcc. O comportamento magnético local e o deslocamento isomérico do Fe vizinho à impureza é analisado e comparado com dados experimentais e resultados de outros cálculos teóricos, quando existentes.

[1] S. Frota-Pessôa, L.A. de Mello, H.M. Petrilli and A.B. Klautau, Phys. Rev. Lett. 71, 4206 (1993) [2] H.M. Petrilli and S. Frota-Pessôa, Phys. Rev. B 48, 7148 (1993) [3] H. Akai, S. Blügel, R. Zeller, and P.H. Dedrichs Phys. Rev. Lett. 56, 2402 (1986).

CORRELAÇÕES MAGNÉTICAS NO MODELO DE ANDERSON: UM ESTUDO PARA TRÊS IMPUREZAS

ABAL, G.; SIMÕES, A. DA R.
UFRGS

Estudamos a competição entre as interações magnéticas RKKY e efeito Kondo de três impurezas, imersas num mar de elétrons de condução, num modelo descrito a partir do Hamiltoniano de Anderson não degenerado. Resolvemos exatamente a parte local do modelo e tratamos os termos não locais, relativos a banda de condução, como perturbação. Assim, tanto a hibridização como a interação local de Coulomb são tratados de forma exata. Caracterizamos o estado fundamental em função dos parâmetros do modelo local e, a partir deste estado fundamental, calculamos as susceptibilidades e as correlações magnéticas (induzidas pelas interações RKKY) entre as três impurezas. Numa rede com tais interações geralmente ocorre frustração porque não é possível satisfazer todas as interações antiferromagnéticas e, esta frustração poderá favorecer o efeito Kondo. Tal mecanismo tem sido sugerido recentemente e desenvolvido por considerações similares aos compostos de RMn_2 , os chamados "férmions pesados $3d$ ".

Photothermally modulated magnetic resonance in Gadolinium: a study of the line-shape around the ferro-paramagnetic transition

ROMANO, J. A.; MANSANARES, A. M.; SILVA, E. C.
DA; VARGAS, H.

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual
de Campinas, UNICAMP*

The ferro-paramagnetic phase transition in Gd has been observed using conventional and photoacoustic detection of magnetic resonance. In this work we used the photothermally modulated magnetic resonance (PM-MR) detection. We report results obtained on polycrystalline Gadolinium as a function of the sample dc temperature, which was varied from $4^{\circ}C$ to $72^{\circ}C$ (literature value for the transition temperature was found to be $16^{\circ}C$).

In PM-MR, an intensity modulated laser beam is used to heat the sample, which is located in a microwave resonant cavity. The temperature oscillation modulates the sample magnetic susceptibility, originating an ac component of the microwave absorption at the laser modulation frequency. This ac absorption is conventionally detected by a diode and analyzed by a lock-in amplifier. The measured signal is proportional to the temperature derivative of the susceptibility. The experimental setup was based on a Varian E-Line EPR Spectrometer with a home-made wall-less cylindrical TE_{011} cavity ($9.45GHz$), and an Ar^+ laser beam was used to heat the sample. The modulation frequency was $196Hz$, and the magnetic field was scanned from zero to $10kOe$.

The signal line position shifts and the line shape changes when temperature varies. The maximum amplitude of the signal is obtained around the transition temperature. A theoretical analysis of the line-shape is done based upon the temperature derivatives of the absorption intensity, the external field for resonance and the line-width.

LOCALIZAÇÃO EM SISTEMAS 'TIGHT-BINDING' COM IMPUREZAS SOB A AÇÃO DE CAMPOS ELÉTRICOS.

BRITO, P. E. DE; SILVA, C. A. A. DA; NAZARENO,
H. N.

CIFMC - UnB - BsB

Foi resolvido o problema de localização dinâmica num sistema 1-D com impureza sob a ação de campos elétricos dc. Foi trabalhada a solução do problema dinâmico (dependente do tempo) para um modelo 'tight-binding'. Obtendo-se assim a evolução temporal das amplitudes de Wannier (propagadores) para determinada condição inicial. É mostrado que, para um valor fixo do potencial de impureza e variando a intensidades do campo elétrico, energias no sítio devem degenerar-se, favorecendo assim o 'hopping' que resulta numa oscilação forte do portador entre esses dois sítios quando eles são primeiros vizinhos (campo intenso). No caso em que os níveis degenerados estejam afastados (campo débil) a partícula que inicialmente estava localizada no sítio da impureza, permanece quase completamente localizada. Como uma aplicação destes resultados teóricos, é proposto um método que permite a determinação do nível de impureza numa superrede.

UMA NOVA FORMA DE APROXIMAÇÃO PARA A RESPOSTA DIELÉTRICA DE UM GÁS DE ELÉTRONS INTERAGENTES.

BRITO, J. J. DA S.

Fundação Universidade de Brasília

Como se sabe, a função dielétrica RPA torna-se exata nos limites de longos comprimentos de onda e altas densidades, mas superestima a correlação eletrônica de curto alcance entre as partículas na região de densidades metálicas, o que conduz a um comportamento não físico da função de distribuição de pares, cuja positividade e normalização são flagrantemente violadas por esta teoria. Formulações mais elaboradas que incorporam, linearizadamente, as interações elétron-elétron amenizam mas não eliminam totalmente estas e outras dificuldades. Neste trabalho apresenta-se um cálculo para resposta dielétrica do gás de elétrons homogêneo, que elimina estes problemas. Isto é feito introduzindo diretamente na expressão de Lindhard, funções de prova com parâmetros variacionais que tornam-se sem efeito em altas densidades e longos comprimentos de onda,

mas que reescalam seus termos nos demais limites. Estes parâmetros ficam sujeitos aos vínculos impostos pela função de correlação de pares e são obtidos de modo a minimizar a energia do sistema. Vínculos adicionais podem ser incorporados através da regra de soma f-longitudinal ou das relações de Kramers-Kronig.

MAGNETISMO E CORRELAÇÃO ELETRÔNICA EM CADEIAS INOMOGÊNEAS

PAIVA, T.

Departamento de Física, PUC/Rio

SANTOS, R. R. DOS

*Departamento de Física, PUC/Rio e Instituto de Física,
UFF*

Motivados pelo comportamento oscilatório da constante de *exchange* em multicamadas metálicas magnéticas, estudamos férmions em cadeias de N_s sítios em que a repulsão coulombiana, U_i , depende do sítio. Assim, sítios magnéticos são simulados por $U \neq 0$, e sítios não-magnéticos por $U = 0$. Para uma dada configuração dos U_i e para diferentes densidades de elétrons, o momento magnético local, correlações de carga e a suscetibilidade, $\chi(\mathbf{q})$, são obtidos através de diagonalizações exatas da Hamiltoniana em cadeias com $N_s = 4$ e 6. Diversas configurações de U_i são analisadas, o que nos permite estabelecer uma relação entre a 'largura' da camada magnética e as correlações antiferro- ou ferromagnéticas.

EXCITAÇÕES NÃO-LINEARES EM UM SISTEMA MAGNÉTICO BIDIMENSIONAL ANISOTRÓPICO

RODRIGUES, S. G.; PIRES, A. S. T.

UFMG

Neste trabalho estudamos excitações não-lineares em um sistema magnético através de um modelo XY bidimensional com uma anisotropia no plano, no limite contínuo. Escrevendo o spin do sistema em termos de ϕ (ângulo que o spin no plano faz com um eixo arbitrário), a equação de movimento para ϕ é uma equação de sine-Gordon bidimensional

$$\Delta\phi = 1/\lambda_p^{-2} \sin(p\phi),$$

onde p é a anisotropia do sistema. Estudamos as soluções desta equação para $p = 4$ e calculamos a energia das excitações topológicas, através da equação para a energia das configurações variando lentamente (na presença de uma anisotropia)

$$E = J \int \int dx dy \left\{ \frac{1}{2} [\nabla\phi(x, y)]^2 + (\lambda_p^2)^{-1} [1 - \cos(p\phi)] \right\}.$$

Como a anisotropia no plano causa uma transição de fase do tipo Ising, estudamos também os efeitos das excitações não-lineares nesta transição.

Simulações de Monte Carlo em Sistemas DAFF d=2

KONZEN, F.; LEITÃO, U. A.

Dep. Física, Universidade Federal de Minas Gerais

E-MAIL LEITAO@BRUFMG.BITNET

Antiferromagneto Ising, diluído e em campo aplicado, (DAFF), é uma realização experimental de Sistema Ising em Campo Aleatório, RFIM. Apesar do grande esforço para compreensão deste sistema, suas propriedades dinâmicas permanecem em grande parte desconhecidas. Foram realizadas simulações de Monte Carlo em sistemas antiferromagnéticos com dimensão $d=2$, com o objetivo de estudar a dinâmica crítica e os processos de relaxação temporal das grandezas termodinâmicas. Foram simulados sistemas puros e diluídos em 20% para processos: (i) variação de temperatura à campo magnético constante; (ii) relaxação temporal à campo magnético constante pelos procedimentos de resfriamento a campo nulo (ZFC) e a campo aplicado (FC) e (iii) variação de campo magnético à temperatura constante. Em cada processo foram avaliadas as médias em várias configurações; diversas dimensões lineares do sistema e a utilização dos métodos de "up-dating" sequencial e aleatórios. Os resultados do sistema puro estão de acordo com a solução exata de Onsager. No sistema diluído o diagrama de fases aparentemente indica a existência de uma fase de Spin Glass a baixas temperaturas.

Este trabalho foi financiado pela agências FAPEMIG, CNPq e FINEP.

ESTUDOS DE RMN NOS COMPOSTOS

$Ce(Ru_{1-x}M_x)_2Ge_2$, $M = Fe, Au$

FONTES, M. B.

CBPF/UFF

ALIAGA-GUERRA, D.

Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Ingenieria.

Lima. Peru

GAVILANO, J. L.

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH-Hönggerberg,

Zürich, Suíça.

ELMASSALAMI, M.

CBPF

GUIMARÃES, A. P.

CBPF/CNPq

O $CeRu_2Ge_2$ é um composto intermetálico interessante que pertence a mesma família de conhecidos sistemas Férmions Pesados com a mesma estrutura cristalina do

$ThCr_2Si_2$. Ele se ordena ferromagneticamente abaixo de 7,5K, e tem uma temperatura Kondo estimada como sendo menor que 1K. A massa dos elétrons está aumentada de somente cerca de três vezes comparada àquela do elétron livre, o que não o caracteriza como um sistema férmion pesado típico. Estamos estudando mudanças das propriedades magnéticas deste composto induzidas pela substituição de Ru por Fe ou Au em pequenas concentrações. Apresentaremos o primeiro estudo de RMN nesta série de compostos, tendo como núcleos sonda para RMN o ^{101}Ru , ^{99}Ru e o ^{73}Ge . Para a amostra pura e as amostras contendo Au não observamos sinal de RMN, na faixa de operação do nosso espectrômetro que é de 5 a 100MHz. Para as amostras com Fe observamos as ressonâncias do ^{101}Ru na faixa de 80 a 82MHz, e a do ^{73}Ge na faixa de 43 a 73MHz, sendo que a do ^{99}Ru está misturada com a do ^{73}Ge em torno de 55MHz. Os resultados observados tem como possível explicação que presença de impurezas de Fe, ao contrário das impurezas de Au, faz aumentar a mobilidade das paredes dos domínios.

**ESTUDOS DAS PROPRIEDADES
MAGNÉTICAS E DE TRANSPORTE NO
COMPOSTO $Ce(Ru_{1-x}M_x)_2Ge_2$, M = Fe, Au**

FONTES, M. B.

CBPF/UFF

ELMASSALAMI, M.; SAITOVITCH, E. B.;

GIORDANENGO, B.; BUD'KO, S. L.

CBPF

GUIMARÃES, A. P.

CBPF/CNPq

O $CeRu_2Ge_2$ é ferromagnético abaixo de 7,5K, possuindo uma segunda transição em 8,5K, de origem ainda não bem conhecida, e que está presente somente em amostras policristalinas. Estamos interessados em estudar as mudanças das propriedades magnéticas e de transporte no composto $CeRu_2Ge_2$ pela substituição de Ru por um elemento magnético (Fe) ou por um não magnético (Au). Preparamos a série $Ce(Ru_{1-x}M_x)_2Ge_2$ nas concentrações $x = 0,005, 0,015, 0,03, 0,05$ e $0,1$. As medidas de Raio X mostram que todas as amostras preparadas possuem a estrutura cristalina desejada do $ThCr_2Si_2$, com exceção da amostra de 10% de Au que apresenta uma fase espúria de cerca 18%, indicando que o limite de solubilidade destes compostos com Au é baixo. Apresentaremos também medidas de Susceptibilidade AC, Magnetização, e Resistividade onde os efeitos da adição de impurezas de Fe e Au neste composto podem ser determinados. Medidas de Mössbauer feitas nas amostras de Fe mostram que este elemento está sendo incorporado à estrutura e que o mesmo não possui momento magnético.

Workshop: Sistemas Fortemente Correlacionados I (MMM, EST, SUC, SEM) – 09/06/94

**CORRELATED ELECTRONS IN HIGH DIMENSIONS: A NEW CLASS OF
SINGLE-IMPURITY PROBLEMS**

VOLLHARDT, D.

Institut für Theoretische Physik C Technische Hochschule Aachen, Templergraben 55, 52056 Aachen, Germany

In the limit of large spatial dimensions d , i.e. large number of nearest neighbors, spin problems often reduce to an effective single-site theory. Only recently did it become clear that this limit also provides the natural mean-field theory for strongly correlated electron systems, i.e. itinerant quantum-mechanical systems. This *dynamical* mean-field theory is equivalent to a self-consistently embedded single-impurity problem. Thus, using standard numerical methods for treating single-impurity problems, one may numerically solve the corresponding infinite-dimensional lattice problem at not too low temperatures and/or strong interactions. This has become a very active and successful area of research, with applications to the Hubbard, Periodic Anderson, Holstein and other models, and has yielded the first numerically exact solution of these models in any dimension other than one. Apart from that we now know that several standard approximation schemes in condensed matter theory become exact in $d = \infty$. Therefore it is now possible for the first time to perform systematic, controlled improvements of these approximations. It turned out that many essential features of systems in $d = 3$, and even lower dimensions, are well described by the results for $d = \infty$ and extensions to $d < \infty$. The talk will provide a simple, pedagogical introduction into the topic and the results obtained so far.

DUAS IMPUREZAS EM METAL

OLIVEIRA, L. N.; SILVA, J. B.; OLIVEIRA, W. C.; LIMA, W. L. C.
Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

O problema Kondo de duas impurezas contribui para a teoria dos sistemas eletrônicos correlacionados um exemplo claro de competição entre o acoplamento de momentos magnéticos em sítios diferentes (interação RKKY) e a compensação dos momentos pelos elétrons de condução ao seu redor (efeito Kondo). Nos últimos anos, métodos teóricos testados no modelo de uma impureza foram adaptados para o modelo de duas. Daí resultou compreensão semi-quantitativa das propriedades físicas do estado fundamental do problema, mas as aproximações feitas na adaptação deixaram algumas perguntas importantes sem resposta; em particular, há controvérsia sobre a existência de um ponto crítico separando a fase de acoplamento antiferromagnético forte entre os momentos magnéticos da fase de acoplamento forte entre cada impureza e os elétrons de condução. Este trabalho aplica uma nova técnica de grupo de renormalização numérico baseada inteiramente em aproximações controláveis. Além de responder às questões sobre o estado fundamental, ele apresenta o primeiro cálculo essencialmente exato da dependência térmica da susceptibilidade magnética das impurezas. Em função da razão entre o acoplamento RKKY e a temperatura Kondo, os resultados dividem o espaço paramétrico em três regiões: (i) acoplamento RKKY ferromagnético forte, (ii) acoplamento RKKY fraco, e (iii) acoplamento RKKY antiferromagnético forte. As fronteiras entre os três domínios são, porém, difusas.

METAL-NON METAL TRANSITION IN THE HUBBARD MODEL

ANDA, E. V.
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

The Metal-insulator transition is studied in a highly correlated system described by a Hubbard Hamiltonian containing one electron per atom. The dynamical properties are studied using a combination of approaches. The one-particle Green function is calculated through the equation of motion. The two-particle Green functions appearing in the equations are decoupled in a defined operator space so as to satisfy a variational principle. The terms added to the decoupled equation of motion, in order to recover the exact result, are calculated using a self-consistent second order perturbation expansion for the self-energy in terms of the Coulomb interaction parameter U . A Mott transition is predicted, preceded by the formation of a peak at the Fermi level which transforms into a pseudo-gap increasing U and into a gap at $U = U_c$. The system results to be a marginal Fermi liquid at the transition. The results are compared with some results obtained at infinite dimensions, some Monte Carlo simulations and a minimal theory recently proposed, based upon the philosophy of the Hubbard III solution for the Hamiltonian.

Sistemas Fortemente Correlacionados II (MMM) - 09/06/94

EVOLUÇÃO DO EFEITO KONDO EM $(La_{1-x}Ce_x)_3Al$ CARACTERIZADO POR SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA E RESISTIVIDADE

MEDINA NETO, A.; GANDRA, F. C. G.
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP- IFGW

Neste trabalho apresentamos medidas de resistividade elétrica $\rho(T)$ e susceptibilidade magnética $\chi(T)$, para a série de compostos $(La_{1-x}Ce_x)_3Al$ com $0 \leq x \leq 1$, para temperaturas no intervalo de 2 a 300K e de 2.8 a 25K respectivamente. Para $x \leq 0.04$ podemos ob-

servar uma transição supercondutora, com $T_c = 5.2K$ para $x = 0$, que diminui linearmente com o aumento da concentração de Ce, de acordo com a teoria de Abrikosov e Gorkov. Para concentrações iguais ou maiores que 0.05 observamos o aparecimento de um mínimo na resistividade ao redor de 6K, característico de um sistema Kondo e que se torna mais evidente com o aumento da concentração, deslocando-se para temperaturas superiores. Os dados de susceptibilidade magnética para baixas concentrações ($x \leq 0.07$) estão em boa concordância com os valores calculados considerando o ion Ce^{3+} na presença de um campo cristalino hexagonal. Em vista destes resultados podemos considerar que para estas concentrações o elétron 4f do Ce é localizado. Na fase rica em Ce, $x > 0.2$, observamos uma diminuição no valor da susceptibilidade, mostrando que o

momento magnético médio do Ce diminui consideravelmente. Este fato é atribuído ao efeito de blindagem dos elétrons de condução que se acoplam antiferromagneticamente com o momento localizado, em concordância com o aumento do efeito Kondo observado na resistividade. Além disso dados preliminares de R.P.E. do Gd^{3+} por nós obtidos, mostram uma diminuição no tempo de flutuação de spin do Ce com o aumento da concentração. Resultados análogos foram obtidos para outros compostos a base de Ce^1 .

[1] - M.Coldea, H.Schaeffer, V.Weissenberger, and B.Elschner, *Z.Phys. B - Cond. Matter* 68, 25 (1987)

SLAVE BOSON APPROACH TO LOCAL MOMENT FORMATION IN THE HUBBARD MODEL

RIBEIRO-TEIXEIRA, R. M.

Instituto de Física, UFRGS

AVIGNON, M.

LEPES, C N R S, Grenoble, França

We consider the existence of disordered local moments in an itinerant magnetic metal described by the Hubbard model. The intra-atomic correlations U are treated using the Slave-Boson approach and we determine the criterion for the formation of disordered local moments at half-filling and compare with the local Hartree-Fock approximation. A detailed study of the properties of this phase is presented as a function of U , in particular at large U for different densities of states. Local moments are found to occur in a discontinuous way at a critical value of U with a metal-insulator transition taking place.

ONDAS DE SPIN EM CADEIA POLIMÉRICA DE HUBBARD COM TRÊS BANDAS

SANTOS FILHO, A. R. G. DOS; RAPOSO, E. C. P.;

COUTINHO-FILHO, M. D.

UFPE

SANTOS, M. C. DOS

UNICAMP

Estudamos o modelo de Hubbard com interação intrasítio, U , e hopping, t , entre primeiros vizinhos em uma cadeia polimérica losangular com três átomos por célula unitária [1]. Os autovalores de energia levam a uma estrutura de três bandas para o problema, sendo uma localizada e duas dispersivas [1]. Neste trabalho propomos operadores próprios de criação e destruição de elétrons nas bandas, cuja relação com os operadores análogos para sítio, ambos com momento k definido no espaço recíproco, é tal que satisfaçam propriedades de ortogonalidade, e cuja transformação entre operadores de sítio e de banda seja unitária. Este formalismo nos permite determinar a equação geral que descreve

as energias de excitações do sistema. Estudamos o comportamento de ondas de spin em vários limites de U/t e número de elétrons por sítio, como por exemplo, o limite isolante (banda semi-cheia), à temperatura nula. Referências:

[1] A.M.S.Macêdo, M.D.Coutinho-Filho, C.A.Macêdo, *R.Bras.Fís.* 21, 121 (1991); A.M.S.Macêdo, M.C.dos Santos, M.D.Coutinho-Filho, C.A.Macêdo, *Magnetism and Phase Separation in Polymeric Hubbard Chains* (a ser publicado).

APROXIMAÇÕES COMPLETAS PARA O MODELO DE ANDERSON PERIÓDICO.

FIGUEIRA, M. S.

UFF

FOGLIO, M. E.

UNICAMP

O Modelo de Anderson Periódico (MAP), expresso em termos de operadores X de Hubbard, é estudado através de expansões perturbativas em cumulantes à temperatura finita [1]. É apresentada uma nova classe de aproximações para as funções de Green do MAP, no limite $U \rightarrow \infty$, que satisfaz a relação de completude dos elétrons localizados [1]. São apresentados resultados para a completude, para os números de ocupação e para a densidade espectral de duas dessas aproximações no limite de banda nula e para uma banda larga retangular de elétrons de condução de largura $2D$. [1] M. S. Figueira, Tese de Doutorado, UNICAMP (1994).

A Generalized Mean Field Approach for Ordered Phases in the Extended Hubbard and Peierls-Hubbard Models

LAGOS, R. E.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

We develop a general mean field scheme to study the Extended Hubbard Model (including the dynamical term known as correlated hopping) and the Peierls-Hubbard Model. This general method yields, in a variational and statistical fashion, several levels of approximations, namely: Symmetry Breaking Hartree-Fock, Adiabatic Approximation, the several Hubbard solutions, the $AA-CPA$ and the generalization of the latter, the Cluster Effective Medium Approach, developed by us. Furthermore we generalize the above mentioned scheme for a full non-adiabatic solution (restricted to the zero temperature case). Density of states, correlations functions and phase diagrams for these systems can be computed within a single approach at the several levels described above, enabling a direct probe of the virtues and shortcomings of these approximations. Of special interest for us is the study of the magnetic and electrically ordered phases, metal-insulator transition and eventually the superconductive phase of such systems (R. E. Lagos, *Physica* 1994, accepted).

Transferência de Carga e Efeitos de Localização em Fullerites Dopados com Metais Alcalinos

GARAVELLI, S. L.; FERRAZ, A.

CIFMC - BsB

Neste trabalho estudamos a transferência de carga e efeitos de localização em fullerites dopados com metais alcalinos. O parâmetro r_s , distância intereletrônica, é utilizado para a caracterização de condutores, o valor crítico r_s^* , é o valor limite para o qual um íon colocado em um gás de elétrons livres, captura um elétron formando um estado ligado. No caso de um cristal metálico a formação de estados ligados indica a redução da densidade de elétrons de condução consequentemente a proximidade da transição metal-isolante. Fazendo um estudo comparativo dos r_s para os fullerites dopados com os r_s^* correspondente a tipo de átomo dopante, mostramos que estes materiais possuem uma natureza eletrônica altamente correlacionados. Obtemos ainda que A_xC_{60} para $x = 3$ e $A = K, Rb$ e Cs na forma cristalina se apresenta como um mal metal, e que para estequiometria $x = 4, 6$ e Na_3C_{60} é no máximo um semicondutor.

Magnetismo I (MMM) - 09/06/94

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE LIGAS

$[Sm_{1-x}MM_x]_2Fe_{17}N_{(3-\delta)}$ MM = MISCHIMETAL

ARAÚJO, R. C. DE; CABRAL, F. A. O.

UFRN

É conhecido que o nitrogênio, ao entrar intersticialmente, provoca uma acentuada melhoria nas propriedades magnéticas dos compostos R_2Fe_{17} , onde R é uma terra rara. Os melhores resultados são apresentados para o $Sm_2Fe_{17}N_{2,9}$, com uma temperatura de Curie de 473 °C, uma magnetização de saturação de 1.52T e um campo de anisotropia de 21T à temperatura ambiente. No presente trabalho é estudado a substituição parcial do Sm por um Mischimetal de terra rara, rico em Ce, cujas ligas podem ser representadas por $[Sm_{1-x}MM_x]_2Fe_{17}N_{3-\delta}$, com $x = 0.0$ a 0.6. Análises de metalografia ótica e difratometria de raio-x mostram que há formação de mais de uma fase, quando a substituição excede $x = 0.5$. Difratometria de raio-x mostra também que a absorção de nitrogênio é semelhante ao composto sem mischimetal nitrogênio. Resultados de análise termomagnética mostram temperatura de Curie acima de 400 °C. Resultados de anisotropia magnética serão aqui discutidos.

ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DE COMPOSTOS $[Sm_{1-x}MM_x]_2Fe_{17}N_{(3-\delta)}$ COM MM = MISCHIMETAL

ARAÚJO, R. C. DE; CABRAL, F. A. O.; ARAÚJO, J.

H. DE; OLIVEIRA, J. DE

UFRN

Recentes estudos no campo de materiais magnéticos levaram à descoberta de um nitreto de Sm que pode ser escrito na forma $Sm_2Fe_{17}N_{2,6}$, este composto se apresenta como o mais promissor de todos os nitretos à base de terra rara para aplicação em magnetos permanentes. A estrutura do composto é do tipo Th_2N_{17} , o nitrogênio ao entrar na rede não altera a estrutura do composto original Sm_2Fe_{17} , provoca um aumento de 6-7% no volume, e uma considerável melhora nas propriedades magnéticas. Espectroscopia Mössbauer é usada para estudar as modificações do campo hiperfino quando o Sm é parcialmente substituído por um Mischimetal rico em Ce. Efeitos de orientação de partículas, no espectro, serão aqui discutidos.

ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES MAGNÉTICAS LOCAIS DE LIGAS DE Fe NA FASE HCP

FRANÇA, F.; PADUANI, C.

UFSC

As propriedades magnéticas do metal Fe nas fases BCC e FCC são bem conhecidas, enquanto em uma fase instável como a fase HCP, são freqüentemente investigadas em condições onde esta é instável ou em ligas substitucionais ou intersticiais nesta fase. Medidas com efeito Mössbauer no Fe HCP sob alta pressão revelam a ausência de campo magnético interno na temperatura ambiente. Neste trabalho investigaremos a estrutura eletrônica e as propriedades magnéticas locais do Fe HCP, com o método variacional discreto (DVM). Calculamos a densidade de estados, o momento magnético, o campo magnético hiperfino e o desvio isomérico com o modelo do aglomerado embebido, simulando microcristais de Fe HCP. Investigamos ainda a dependência destas propriedades com os parâmetros de rede.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS LOCAIS E ESTRUTURA ELETRÔNICA DO $\gamma' - Fe_4N$

KRAUSE, J. C.; PADUANI, C.

UFSC

Os nitretos de ferro têm sido objeto de estudo há vários anos, considerando suas promissoras aplicações tecnológicas, tais como gravações de alta densidade e filmes de recobrimento. O nitreto de ferro $\gamma' - Fe_4N$ ainda tem alguns pontos de controvérsia nas suas propriedades magnéticas, este nitreto tem uma estrutura cristalina cúbica onde átomos de ferro ocupam 2 sítios não equivalentes, nos sítios dos vértices do cubo (FeI) e nos sítios de faces centradas (FeII), enquanto os átomos

de nitrogênio estão no centro do cubo. Investigamos neste trabalho as propriedades magnéticas locais e a estrutura eletrônica do γ' - Fe_4N com o método variacional discreto (DVM). Analizamos a densidade de estados e a dependência do momento magnético do campo hiperfino de desvio isomérico com o espaçamento da rede, em aglomerados moleculares simulando cristais deste composto.

Structural relaxation of $Cr_{65}Fe_{35}$ amorphous powder: a Mössbauer study

PARTITI, C. S. M.; RECHENBERG, H. R.

Instituto de Física da USP

XIA, S. K.

CBPF - Rio de Janeiro

The dependence of mechanical, relaxation, thermal, and magnetic properties of amorphous alloys on annealing has been studied extensively. Recently work on $Cr_{65}Fe_{35}$ amorphous powder obtained by mechanical milling indicated that some of atoms relax to a more densely packed structure, while others remain in a unrelaxed and loosely packed structure. We could then expect a significant structural relaxation after an annealing below the crystallization temperature. We studied two mechanically alloyed $Cr_{65}Fe_{35}$ powders. One is as-milled powder and the other one is the same powder but was annealed at 673 K for two hours. The Mössbauer spectra of the two samples were measured at temperatures between 80 K and 300 K. All the spectra were typical example of spectrum for amorphous sample in all range of temperature and fitted with a quadrupole splitting distribution. The spectral area dependence of temperature for the two samples was fitted by Debye model. For the first sample $\theta_D = 440K$ and for the annealed one $\theta_D = 530K$. Thus a structural relaxation related to short-range atomic rearrangement occurred during annealing treatment which do not cause crystallization.

SPIN REORIENTATION TRANSITION IN

$DyFe_{10}Si_2$

NAGAMINE, L. C. C. M.; RECHENBERG, H. R.

Instituto de Física da USP

The spin reorientation (SR) of $DyFe_{10}Si_2$ has been investigated. The AC susceptibility of a powder sample exhibits a sharp peak at $T=228$ K, otherwise it behaves smoothly down to 4.2 K. Mössbauer spectra, measured at temperatures between 78 and 296 K, were fitted with three subspectra corresponding to Fe sites 8i, 8j and 8f. The average hyperfine field varies proportionally to the Fe sublattice magnetization between 78 and 200 K, as well as (with a 4% smaller proportionality constant) between 240 and 296 K. Quadrupole splittings, likewise, vary strongly in the 200-240 K interval, but remain remarkably constant from 200 K downwards.

These data indicate the onset of an axial-conical transition at $T_{SR} \approx 235$ K, which is completed at 200 K, and - in contrast to $DyFe_{11}Ti$ - is not followed by a conical-planar transition at a lower temperature. The latter conclusion agrees with results by Christides *et al.* [Phys. Rev. B44 (1991) 2182].

ESTUDO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FERROFLUIDOS

INÁCIO, F. DE A.; OLIVEIRA, A. C. DE

UnB

GAMA, S.

Unicamp

Partículas ferromagnéticas com um tamanho típico de 100Å formam mono domínios magnéticos e, quando dispersas em um líquido portador, podem permanecer em suspensão coloidal indefinidamente devido a agitação térmica. Tais líquidos, comumente chamados de ferrofluidos, exibem propriedades magnéticas interessantes possuindo inúmeras aplicações científicas e tecnológicas. A magnetização devido a um campo magnético estático segue a equação de Langevin do paramagnetismo, mesmo em temperatura de nitrogênio líquido as curvas de magnetização não apresentam histerese magnética. Quando esses líquidos recebem um estímulo magnético periódico, apresentam tanto relaxação de Brown (movimento mecânico de rotação da partícula), quanto de Néel (movimento somente do vetor magnetização da partícula). Utilizando um oscilador Robinson determinamos a suscetibilidade magnética estática e, também, as partes real e imaginária da suscetibilidade dinâmica para uma amostra e suas diluições em líquido portador. Observamos ainda, o comportamento da suscetibilidade magnética estática com a amostra em temperatura de 77K.

ESTUDO DAS LIGAS NANOCRISTALINAS

$Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ POR RMN.

ALIAGA-GUERRA¹, D.; IANNARELLA, L.; FONTES,

M. B.; GUIMARÃES², A. P.

CBPF/CNPq

SKORVÁNEK², I.

Institute of Experimental Physics SAS, 04353 Kosice,

Slovakia

Medidas de ecos de spin em Ressonância Magnética Nuclear (RMN), a 4,2K, foram realizadas com ligas amorfas e parcialmente cristalinas de composição $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$, utilizando-se amostras com diferentes proporções das fases amorfa e cristalina, obtidas por tratamentos térmicos controlados. As experiências, feitas na faixa de frequências 10-100 MHz, exibiram várias linhas de ressonâncias. As linhas de ^{57}Fe são visíveis no intervalo 20-40 MHz e os campos hiperfinos correspondentes são comparáveis aos obtidos por Espectroscopia Mössbauer. Na faixa de 60-100 MHz as li-

nhas de ressonância resultam dos núcleos de ^{93}Nb . A liga amorfa original apresenta uma linha principal a 82 MHz, correspondendo a um campo hiperfino de aproximadamente 8 T. Com o tratamento térmico, as linhas de Nb estreitam-se e desdobram-se, mostrando uma tendência a ordem local. Este trabalho demonstra como RMN pode ser usada para investigar a cinética dos processos de cristalização, acompanhando as ressonâncias nucleares de diferentes elementos presentes na liga. ¹Enderêço permanente: Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingenieria, P.O. Box 31-139, Lima 31, Peru. ²Atualmente, no Massachusetts Institute of Technology, Cambridge MA 02139, USA.

DETERMINAÇÃO SIMULTÂNEA DA SUSCETIBILIDADE E DA RESISTIVIDADE AC EM AMOSTRAS CILÍNDRICAS DE COBRE

FARIA, C. C. DE; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo, Univ. Federal de São Carlos, Caixa Postal 676, Cep 13565-905, São Carlos - SP

A técnica utilizada para determinação simultânea da suscetibilidade e resistividade ac em metais consiste em detectar a tensão de saída de transformadores cilíndricos cujo núcleo é a amostra que se deseja estudar. Esta tensão pode ser expressa como a soma de uma componente resistiva (V_R) e outra indutiva (V_L), que são separadas por meio de uma Ponte de Hartsorn ou um Circuito Defasador. Ambas as componentes podem ser expressas como uma série convergente de potências de μ/ρ . Para amostras cilíndricas longas e no limite de baixas frequências (ou seja, alta profundidade de penetração do campo eletromagnético) essas séries podem ser truncadas a fim de se obter as expressões para a permeabilidade (μ_{ac}) e a resistividade (ρ_{ac}). Através de um suscetômetro-ac que opera em temperaturas desde 77 até 350K obtivemos as curvas para a resistividade ac de amostras cilíndricas de cobre comercial de vários comprimentos. A fim de confirmar os resultados obtidos também foram realizadas medidas da resistividade ac do cobre pela técnica de quatro terminais.

Espectroscopia Mössbauer de compostos

$\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ parcialmente nitretados

ARDISSON, J. D.; BATISTA, F. A.; CAMPOS, A. A. G.; PERSIANO, A. I.

Departamento de Física - UFMG

Ligas $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ com diferentes conteúdos de nitrogênio entre zero e cerca de 2,2 átomos N por fórmula unitária foram preparadas e analisadas por espectroscopia Mössbauer. Os resultados comprovam a presença, desde o início do processo de nitrogenação, de uma fase saturada cristalina da liga binária e parametro de rede

cerca de 2% maior. Como consequência da presença dessa fase no interior da matriz $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$, observou-se o aparecimento de uma distribuição de campos hiperfinos (B_{hf}) a qual foi associada a um gradiente de deformação na fase $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$. Um modelo geométrico de crescimento do nitreto dentro das partículas é proposto a fim de dar conta da evolução dessa distribuição B_{hf} em função do conteúdo de nitrogênio na liga.

Estudo da absorção de hidrogênio em ligas ZrFeCr por espectroscopia Mössbauer

RECHENBERG, H. R.; PARTITI, C. S. M.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

MESTNIK FILHO, J.; MOURA, J. I. DE

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN-SP

A fase de Laves $\text{Zr}(\text{Fe}_{0,5}\text{Cr}_{0,5})_2$, ou ZrFeCr , é capaz de absorver hidrogênio até mais de 3 átomos por fórmula [1]. Com o objetivo de elucidar o processo de absorção e a localização de H na rede, preparamos amostras de ZrFeCrH_x com $x = 0$ a 3, que foram analisadas por espectroscopia Mössbauer do ^{57}Fe à temperatura ambiente. Por difração de raios X, verificamos que a estrutura desta liga é hexagonal (C14). Nesta estrutura os átomos de Fe ou Cr ocupam os sítios 2a e 6h, que são equivalentes entre si somente quando a razão c/a tem o valor ideal 1,633 (em nosso caso, $c/a = 1,639$). O espectro da amostra não hidrogenada é a superposição de dois dubletos com desdobramentos quadrupolares semelhantes e muito pequenos ($QS = 0,1\text{mm/s}$), mas com desvios isoméricos nitidamente diferentes ($IS = -0,32\text{e} -0,10\text{mm/s}$). As áreas dos dubletos são praticamente iguais, indicando que os sítios 2a são inteiramente ocupados por Fe. Após hidrogenação, o QS de um dos subspectros cresce bruscamente para $0,6\text{mm/s}$, enquanto o outro se mantém relativamente pequeno. Os desvios isoméricos, por outro lado, crescem com x de forma linear. Estes resultados são discutidos em termos de dois modelos alternativos para a absorção de H: formação de solução sólida, ou coexistência de um hidreto saturado com a fase não-hidrogenada.

[1] D. Shaltiel, I. Jacob e D. Davidov, J. Less-Comm. Met. 53, 117 (1977)

EFEITOS DE CHOQUE NA SUPERESTRUTURA FeNi DE PARTICULAS METÁLICAS DE METEORITOS ANTÁRTICOS

SCORZELLI, R. B.; AZEVEDO, I.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

O "bulk" de condritos antárticos do tipo L e LL foi analisado por espectroscopia Mössbauer, difração de raios-X e microscopia eletrônica de varredura. Investigamos a presença da fase ordenada FeNi 50/50, superestrutura $L1_0$ em partículas metálicas dos condritos antárticos

$Y - 793539(L6)$, $Y - 8435(L6)$, $Y - 793464(L5)$ e $Y - 793214(LL5)$, usando frações separadas magnética e quimicamente. Nos meteoritos do tipo condritos as partículas metálicas estão dispersas numa matriz silicatada. Essas partículas são constituídas de diferentes fases FeNi cuja presença reflete processos de formação de condritos, bem como de processos metamórficos ocorridos no corpo parental. A análise dos parâmetros hiperfinos (E_q , H_i e) permite obter informações bastante relevantes sobre a história térmica e de choque sofrida por estes meteoritos.

ESTUDO DO PROCESSO DE MOAGEM NO SISTEMA $CeFe_2$

PÉREZ, C. A. S.

IF-UFRJ

GHAFAARI, M.

THD, FRG

BAGGIO-SAITIVITCH, E.; CUNHA, S. F. DA;

TAKEUCHI, A. Y.

CBPF

A comparação entre as propriedades magnéticas dos compostos intermetálicos cristalinos e das correspondentes ligas amorfas é muito valiosa para o estudo do efeito da ordem estrutural cristalina no magnetismo de compostos intermetálicos. Recentemente tem sido realizado um grande número de investigações dirigidas ao estudo das mudanças de estrutura cristalina e magnética provocadas pela absorção de H no composto $CeFe_2$. Os resultados indicam que este composto apresenta um ordenamento estrutural de curto alcance diferente de seus homólogos RFe_2 preparados pelo mesmo método. Além disso, as medidas magnéticas indicam a presença de momento no Ce e incremento de momento do Fe. Em geral podem ser utilizadas diversas técnicas no preparo de ligas amorfas. Neste trabalho apresentamos os primeiros resultados obtidos (difração de raios-X, magnetometria e espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe) na tentativa de amorfizar o composto $CeFe_2$ utilizando a técnica de moagem.

OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE CADINHOS CERÂMICOS PARA CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DA FASE $Fe_{17}R_2$, ($R =$ Terra Rara)

COELHO, A. A.; GAMA, S.; RIBEIRO, C. A.

UNICAMP

LUKAS, H. L.

PML, MAX PLANCK INSTITUTE, STUTTGART, ALEMANHA.

A necessidade de contenção, por tempo prolongado (20 a 30 horas), do líquido na fusão e durante o crescimento de monocristais de $Fe_{17}R_2$, devido à alta reatividade da terra rara acima da temperatura de fusão, nos levou ao desenvolvimento do trabalho em cerâmicas. Os

materiais escolhidos foram CaO , R_2O_3 e CaF_2 . A escolha do CaO se deu por este composto possuir energia de formação menor que a dos óxidos de terras raras. O R_2O_3 foi escolhido por ser o óxido do metal a ser fundido. O CaF_2 por ser mais estável que os fluoretos de terras raras. Para obter cerâmicas de CaO e R_2O_3 ($R = Nd$) prensamos hidrostáticamente os pós em moldes de borracha à pressão de 1500 bar. Sinterizamos os cadinhos à temperatura de 1600°C em atmosfera inerte. O CaF_2 possui ponto de fusão a 1416°C, por isso decidimos fazer o cadinho fundindo o material em um molde de grafite, já que este não é molhado pelo CaF_2 fundido. Os resultados obtidos até o presente momento revelam que há grandes possibilidades nesta linha, apesar de encontrarmos ainda algumas dificuldades. Os cadinhos de CaO testados sofreram ataque pela terra rara, formando R_2O_3 e evaporando o Cálcio. As cerâmicas de R_2O_3 apresentam ainda problemas de solubilidade pelo líquido. Ambas cerâmicas, CaO e R_2O_3 , apresentaram porosidades provocando o encharcamento do cadinho pelo líquido $Fe_{17}R_2$. O CaF_2 mostrou o melhor resultado até o momento, porém sua máxima temperatura de trabalho é da ordem de 1300°C sendo útil apenas para terras raras mais leves, Pr , Nd e Sm . A solução para as cerâmicas CaO e R_2O_3 pode estar na sinterização a temperaturas mais elevadas, em torno de 1800°C para R_2O_3 e 2100°C para CaO .

ESTUDO DE PERDAS NA LIGA AMORFA

$Fe_{78}B_{13}Si_9$

MELO, L. G. C.; LANGAROTTE, M. S.; ALTOÉ, M.

V. P.; SANTOS, A. D.; MISSELL, F. P.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Brasil

Apresentamos neste trabalho o estudo em andamento, das perdas magnéticas em função da frequência, para a liga amorfa $Fe_{78}B_{13}Si_9$. Esta fita está sendo analisada em diferentes condições magnéticas, geradas a partir de tratamentos térmicos com e sem campo magnéticos. A fita amorfa foi produzida usando-se o "melt-spinner" do Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM), a partir de elementos puros. Através de tratamentos térmicos em forno a vácuo, foram induzidas anisotropias tanto longitudinais quanto transversais ao eixo da fita, assim produzindo diferentes estruturas de domínios e portanto diferentes condições magnéticas para o estudo de perdas. As medidas de perdas magnéticas em função da frequência estão sendo feitas com o equipamento recentemente desenvolvido no LMM. Estamos atualmente concluindo a instalação de um sistema de processamento de imagens para a observação de domínios magnéticos. Os resultados experimentais serão comparados à estrutura de domínios presente em cada amostra e analisados em termos de componentes clássica, histerética e anômala, como descrita por Bertotti¹. Trabalho parcialmente financiado por FINEP/PADCT,

CNPq/RHAE e FAPESP. /1/ G. Bertotti, IEEE Trans. Mag.,24(1988).

**MICROESTRUTURA E PROPRIEDADES
MAGNÉTICAS DA LIGA $Fe_{77}R_{15}B_8$
(R="Mischmetal")**

NASCIMENTO, A. F. DO; ARAÚJO, R. C. DE;
ARAÚJO, J. H. DE; CABRAL, F. DE A. O.
UFRN

O efeito da substituição do Nd por um "miscmetal" de terra rara, rico em Cério, na microestrutura e propriedades magnéticas de uma liga de composição $Fe_{77}R_{15}B_8$ é estudado através de Espectroscopia Mössbauer, Susceptibilidade Magnética AC e Metalografia Ótica. Resultados preliminares mostram uma microestrutura onde a fase majoritária, $Fe_{14}R_2B$, coexiste com uma fase rica em terra rara, uma fase paramagnética e ferro livre. A temperatura de Curie do composto $Fe_{14}R_2B$ é de 215°C, portanto, aproximadamente 100°C abaixo da temperatura de Curie do composto com Nd puro ($Fe_{14}R_2B$). Os espectros de Mössbauer da liga mostram que no composto $Fe_{14}R_2B$ os átomos de ferro ocupam 6 sítios não-equivalentes (4e, 4c, 8j₁, 8j₂, 16k₁, 16k₂, 4f), com absorção semelhante à da família de compostos 14:2:1.

**MAGNETIC AND CRYSTALLIZATION
BEHAVIOUR OF AMORPHOUS
 $Co_xFe_{75-x}Si_{15}B_{10}$ ALLOYS**

MIRANDA, M. G. M.; BAIBICH, M. N.
Instituto de Física, UFRGS
SCHIFINO, J.
Instituto de Química, UFRGS
SANTOS, A. D. DOS; NEIVA, A.
Instituto de Física, USP

We have performed thermomagnetic studies of the relaxation and crystallization behaviour of a series of $Co-FeSiB$ amorphous alloys. The results clearly show that, according to the Co-Fe proportion in the alloy, each of the properties measured (crystallization temperature, Curie temperature, activation energies obtained from tree different experiments and magnetostriction) changes behaviour around the non-magnetostrictive composition ($Co_{70.4}Fe_{4.6}Si_{15}B_{10}$).

These results suggest that the two predominant configurations in the amorphous state might be responsible for the observed effects, as is proposed in the current theories for magnetostriction in amorphous metals. These amorphous configurations would follow different paths to crystallization, leading to a second crystallization peak in all experiments.

We suggest, in view of the observed data, that this alloy is particularly suited for experimental comparisons of atomic and magnetic forces present within the various configurations considered.

**MEDIDAS DE TRANSPORTE
ELETRÔNICO EM LIGAS AMORFAS
FERROMAGNÉTICAS**

ANTUNES, A. B.; BAIBICH, M. N.
Instituto de Física - UFRGS

Com o passar dos anos o estudo das propriedades de transporte eletrônico em vidros metálicos voltou à investigação das ligas amorfas ferromagnéticas devido a sua riqueza nas formas de espalhamento eletrônico com vários mecanismos competitivos. Além disso acreditase que haja uma correlação entre essas propriedades e propriedades tais como magnetostricção e relaxação estrutural, entre outras. Neste trabalho foram medidos o poder termoeletrico (TEP), S e a resistividade elétrica, ρ em função da temperatura no intervalo entre 4.2 K e 300 K em fitas amorfas ferromagnéticas pseudobinárias do tipo $Co_{75-x}Fe_xSi_{15}B_{10}$ para $0 \leq x \leq 50$. O coeficiente de temperatura da resistividade elétrica, α ($\alpha = \partial \ln \rho / \partial T$) também foi determinado. Os resultados obtidos para a resistividade elétrica ρ mostram que além da contribuição estrutural predominante ρ_{est} há uma forte contribuição magnética ρ_{mag} no espalhamento eletrônico. Por sua vez as medidas de poder termoeletrico S indicam que o desvio do comportamento linear predito pela teoria estendida de Faber-Ziman é devida basicamente à contribuição magnética S_{mag} .

**EFEITOS DE TAMANHO DE PARTÍCULA E
SUBSTITUIÇÃO CATIONICA EM UM
SISTEMA HEMATITA/GOETITA**

SILVA, J. K. L. DA
Instituto de Física - UFRGS
FELDMANN, G.
UNIJUÍ
COSTA JR, M. I. DA
Instituto de Física - UFRGS

Um sistema natural contendo hematita e goetita em forma de pequenas partículas (1) foi analisado por Difractometria de Raios-X e Espectroscopia Mössbauer objetivando-se estimar o tamanho médio das partículas. Este pode ser obtido através da fórmula de Scherer (2) usando-se os resultados da primeira técnica, e/ou através: (i) da comparação dos espectros Mössbauer medidos com aqueles observados em amostras sintéticas de vários tamanhos de partícula; (ii) estabelecendo-se a temperatura para a qual o tempo de relaxação do vetor magnético da partícula torna-se igual ao período de precessão do spin nuclear no campo magnético hiperfino H; ou (iii) da fórmula de Morup (3) que emprega a medida de H. Usou-se o método (iii) para comparar os valores calculados por ambas as fórmulas e testar os modelos propostos para descrever as propriedades magnéticas de pequenas partículas. O grau de substituição do ferro por Al, p.ex., na hematita e na goetita é estimado através de linhas de reflexão no difratograma.

- (1) M.I. da Costa Jr., J.I. Kunrath, J.B.M. da Cunha, J.T. Moro and J.H. de Araújo, Nucl. Instr. & Methods in Phys. Research B76 (1993) 244.
- (2) H.P. Klug & L.E. Alexander, in: X-ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials, 2nd ed., J. Wiley & Sons, New York, 1974.
- (3) S. Morup & H. Topsoe, Appl. Phys. 11 (1976) 63.
Apoio: CNPq, FINEP, PROPESP, FAPERGS

EFEITO DA MOAGEM SEVERA SOBRE AS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, MAGNÉTICAS E HIPERFINAS DO COMPOSTO YFe_2

LARICA, C.; ALVES, K. M. B.

Univ. Federal do Espírito Santo

BAGGIO-SAITOVITCH, E.; GUIMARÃES, A. P.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Dentre as técnicas empregadas para a obtenção de materiais desordenados, a moagem severa tem mostrado ser eficiente e vantajosa em comparação com métodos tradicionais. Com a moagem, ligas desordenadas podem ser obtidas a partir de compostos cristalinos ou a partir da mistura estequiométrica de elementos em pó. No primeiro caso, estruturas amorfas ou nanocristalinas são estabilizadas através das vacâncias e/ou defeitos criados pelos impactos do moinho. No segundo caso, ligas amorfas ou nanocristalinas são obtidas através da reação de estado sólido entre as micro partículas componentes da mistura. Este trabalho discute os efeitos da moagem ultra severa nas propriedades estruturais, magnéticas e hiperfinas do composto YFe_2 . O composto ordenado foi obtido pelos métodos usuais de fabricação em forno a arco e posteriormente submetido a moagem em atmosfera de gás argônio por até 50 horas. Amostras foram coletadas em tempos predeterminados e analisadas por espectroscopia Mössbauer no Fe, difratometria de raios-x e RNM pulsada no Y. O conjunto de resultados obtidos com essas técnicas demonstra que após 30 horas de moagem a liga está no estado amorfo. Os espectros Mössbauer a baixa temperatura apresentam distribuições de campo hiperfino que permitem acompanhar o crescimento da componente amorfa com o tempo de moagem. São identificados efeitos de relaxação atribuídos a redução no tamanho das partículas. Os resultados concordam com a literatura para o filme amorfo de $Y_{29}Fe_{71}$ fabricado pelo método de condensação de vapor.

MÉTODO DE PREPARAÇÃO DAS LIGAS DE HEUSLER DO TIPO Co_2ScZ ($Z=Al,Ge$).

MIOLA, E. J.; DIONYSIO, M. O.; SOUZA, S. D. DE
DF/UFSCar

Estamos realizando um estudo sistemático de ligas de Heusler baseadas em cobalto, por difração de raio-x e correlação angular γ - γ perturbada. As ligas a serem

estudadas, Co_2ScAl e Co_2ScGe , foram preparadas a partir de quantidades estequiométricas dos seus componentes de alta pureza. Primeiramente, as ligas foram fundidas em forno de arco voltaico em atmosfera de Ar. Em seguida as duas ligas foram submetidas a tratamento térmico para homogeneização $800^{\circ}C$, durante 24 horas. A seguir fizemos um annealing a $600^{\circ}C$ durante 6 dias, e quenching a $600^{\circ}C$ e $800^{\circ}C$ respectivamente. Verificou-se assim o surgimento de outras fases nestas ligas. Para cada tratamento foram realizadas medidas de difração de raio-x e análise térmica das amostras. As duas técnicas são usadas para caracterização das ligas. Os difratogramas de raio-x foram analisados pelo método de Rietveld, que pode nos fornecer informações das porcentagens de cada fase existente. Serão, portanto, discutidos os efeitos dos tratamentos térmicos nas ligas de Co_2ScAl e Co_2ScGe nesta faixa de temperatura.

Aluno de mestrado - CAPES

PERDAS MAGNÉTICAS NA LIGA

$Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ NANOCRISTALINA

EMURA, M.; ALTOÉ, M. V. P.; MISSELL, F. P.

Instituto de Física - USP

A cristalização da liga amorfa $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ leva à formação de uma microestrutura caracterizada por grãos nanocristalinos de FeSi, dispersos em uma matriz amorfa. Esta microestrutura é responsável pela melhoria das propriedades magnéticas da liga, sendo observados baixos valores da magnetostrição, perdas magnéticas, campo coercivo e alta permeabilidade. Dentre tais propriedades, os baixos valores da perda magnética, mesmo em altas frequências, constitui um dos principais atrativos desta liga, tornando-a comparável a ligas amorfas ricas em cobalto. Neste trabalho estudamos a perda magnética na liga $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ tanto no estado amorfo como no nanocristalino. As medidas foram realizadas em um sistema traçador de curvas de histerese que possibilitou determinar a perda magnética em frequências de 0.5 a 1000 Hz, com indução senoidal de baixa distorção. As medidas mostraram uma redução significativa do valor da perda com a variação estrutural da liga. A uma indução magnética de 0.7 T e frequência 50 Hz, foram determinados os valores 0.90 mJ/kg e 0.29 mJ/kg respectivamente para o material amorfo e nanocristalino. Os resultados foram analisados em termos do modelo de Bertotti que procura correlacionar a microestrutura com a dinâmica do processo de magnetização. A perda magnética foi separada em suas várias componentes: perda por histerese, perda clássica e perda em excesso; a partir da perda em excesso foram determinados os parâmetros intrínsecos do modelo como o número de objetos magnéticos, o campo em excesso, e o parâmetro V_0 relacionado com a microestrutura. Embora número de objetos magnéticos apresentasse valores semelhantes

(≈ 12) para ambas estruturas, uma pequena variação de V_0 de 0.18 Å/m para 0.11 Å/m foi observada com a mudança estrutural do estado amorfo para o nanocristalino.

Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E MICROESTRUTURAS DE LIGAS Nd-(20-x)%Fe-x%Ga(-5%B) (x=2,5) (% ATÔMICA) brutas de fusão e tratadas térmicamente

POLITANO, R.; MISSELL, F. P.
Universidade de São Paulo

As amostras brutas de fusão apresentaram uma microestrutura similar à encontrada nas ligas binárias e ternárias Nd-Fe e Nd-Fe-B ricas em Nd. A temperatura de Curie também não foi alterada com a adição de Ga $T_c = 518$ K. Após tratamentos térmicos de 1123 a 1323 K observou-se que os valores da magnetização remanente e de saturação diminuem. Para os tratamentos feitos a 1173 K em diversos tempos observou-se que, após um rápido decréscimo até 30 minutos de tratamento, os valores de magnetização remanente e de saturação sofrem um aumento e tendem a um valor que se estabiliza. Este comportamento indica que a fase metaestável A_1 está sendo substituída por uma outra fase ferromagnética. Isto é possível de ser visualizado através da variação na forma das curvas de histerese magnética. Através deste estudo é demonstrado o potencial de medidas magnéticas para o estudo cinético de transformações de fase, onde a fase de interesse é ferromagnética. No caso presenciou-se a cinética do desaparecimento da fase metaestável A_1 em função da temperatura e do tempo de tratamento térmico.

Estudo de Superparamagnetismo em Lateritas Brasileiras por Espectroscopia Mössbauer

DIAS FILHO, J. H.; PFANNES, H. -D.
UFMG

Espectros Mössbauer de transmissão (^{57}Fe) de vários óxidos de ferro presentes em amostras de lateritas oriundas de diversas regiões do estado de Minas Gerais demonstram a presença de superparamagnetismo. Desenvolvemos um programa de ajuste baseado num modelo estocástico de relaxação usando um hamiltoniano nuclear completo e o formalismo de superoperadores. Os efeitos das excitações coletivas, pequenas oscilações em torno de uma determinada posição de energia mínima do sistema, são introduzidos no modelo implementado nesse programa a partir de uma redução da interação hiperfina magnética. Esses efeitos se manifestam de forma acentuada nos espectros obtidos nas proximidades da temperatura de Blocking. Apresentamos simulações de espectros Mössbauer e os comparamos com

espectros experimentais medidos em várias temperaturas.

Análise de Amostras Geológicas por Espectroscopia Mössbauer

PEREIRA, S. L.; PFANNES, H. -D.
UFMG

É conhecido de estudos paleomagnéticos que os óxidos de ferro quando são depositados lentamente criam um perfil estratificado de camadas, que se alternam com cores e tamanhos de partículas diferentes. Esta formação é o resultado do intemperismo geológico que atuou de forma diferenciada no inverno e no verão do passado geológico. As partículas finas assim depositadas, poderiam girar e se orientar segundo a direção do campo magnético terrestre. Apresentamos os resultados obtidos da análise de algumas amostras geológicas (Hematita fibrosa, Hematita sedimentar e Itabirito), provenientes de área metamórfica e sedimentar. A partir de lâminas finas cortadas das amostras, foram obtidos espectros Mössbauer, numa sequência de ângulos capazes de indicar a direção preferencial dos spins de ferro (textura de spin). Os resultados corroboram a suposição de que as partículas de óxidos de ferro, quando depositadas de forma lenta, alinham-se com o campo magnético da Terra na época da formação da rocha.

EFEITOS DE TAMANHO DE PARTÍCULA E SUBSTITUIÇÃO ISOMÓRFICA EM ÓXIDOS DE FERRO DE SOLOS

RHO, P. A.; COSTA JR, M. I. DA
Instituto de Física - UFRGS
KÄMPF, N.

Faculdade de Agronomia - UFRGS

Uma série de óxidos de ferro da fração argila de solos contendo hematita e goetita em forma de pequenas partículas foi analisada por Difractometria de Raios-X e Espectroscopia Mössbauer objetivando-se estimar o tamanho médio das partículas. Este pode ser obtido através da fórmula de Scherrer (1) usando-se os resultados da primeira técnica, e/ou através: (i) da comparação dos espectros Mössbauer medidos com aqueles observados em amostras sintéticas de vários tamanhos de partícula; (ii) estabelecendo-se a temperatura para a qual o tempo de relaxação do vetor magnético da partícula torna-se igual ao período de precessão do spin nuclear no campo magnético hiperfino H ; ou (iii) da fórmula de Morup (2) que emprega a medida de H . Usou-se o método (iii) para correlacionar os valores calculados por ambas as fórmulas, e testar os modelos propostos para descrever as propriedades magnéticas de pequenas partículas. O grau de substituição isomórfica do ferro por Al, p.ex., na hematita e na goetita é estimado através de linhas de reflexão de cada composto no difratograma.

- (1) H.P. Klug & L.E. Alexander, in: X-ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials, 2nd. ed., John Wiley & Sons, New York, 1974.
 (2) S. Morup & H. Topsoe, Appl. Phys. 11 (1976) 63.
 Apoió: CNPq, FINEP, PROPESP, FAPERGS

Multicamadas e Filmes Magnéticos I
 (MMM) - 10/06/94

Giant magnetoresistance in spin-valve multilayers and granular alloys

DIENY, B.

CEA/Departement de Recherche Fondamentale sur la Matiere Condensee, 38054 Grenoble Cedex 9, France

A comprehensive review of giant magnetoresistance in spin-valve sandwiches, multilayers and granular alloys will be presented. This review highlights the experimental and theoretical results which are of particular interests for the development of applications of these systems especially in magnetic recording technology. The main points which will be discussed include the physical origin of the giant magnetoresistance, the influence of the thicknesses of the magnetic and non-magnetic layers, the role of the interfacial roughness, the dependence on the temperature, the angular-dependence of the giant magnetoresistance and the ability to obtain linear $R(H)$ characteristics. A summary of the properties of some systems among the most promising for low-field applications will be given. Some theoretical results, based on an extended Camley and Barnas's semi-classical theory, will be presented.

GENERATION AND USE OF ENERGY-TUNABLE, HELICITY-TUNABLE, CIRCULAR-POLARIZED HARD X-RAY FOR ELEMENT SPECIFIC INVESTIGATIONS OF MAGNETISM

FONTAINE, A.

LURE - Université Paris-Sud

After a delay of almost a century, synchrotron radiation has been able to associate the original ideas in magnetism of Zeeman and the discovery of X-ray by Rontgen. The new storage rings include insertion devices which are dedicated to polarisation-tunable source UV and X-ray light. In the hard X-ray range, it is possible to produce polarisation tunable using an additional optical device, the phase plate, inserted in the beam emitted from a regular undulator. Based on the variation of the index of refraction in the proximity of Bragg reflections, these single crystal-made phase plates are opening up new classes of X-ray spectroscopies and new resonant methods of diffraction for magnetic materials. The main lines of X-ray magnetic circular dichroism will be discussed. Results on very appealing materials such Cu-Co, Cu-Fe multilayers which exhibit strong magnetoresistance are presented in terms of spin polarisation of the conduction electron of the copper layer when this bidimensional object is sandwiched between magnetic layers.

GIANT MAGNETORESISTANCE IN SPUTTERED $(Co_{70}Fe_{30})_x Ag_{1-x}$ HETEROGENEOUS ALLOYS

TEIXEIRA, S. R.

Instituto de Física, UFRGS

DIENY, B.; CHAMBEROD, A.; COWACHE, C.;

AUFFRET, S.; AURIC, P.; ROUVIÈRE, J. L.

CEA/Centre D'Études Nucléaires de Grenoble,

Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée,

REDON, O.; PIERRE, J.

Laboratoire Louis Néel, CNRS, Grenoble,

x varying between 27 and 47 at.%. The samples were prepared by D.C. triode sputtering at room and liquid nitrogen temperatures. Annealing processes lead to phase segregation and grain growth, resulting in the formation of small and compact $Co_{70}Fe_{30}$ precipitates. The resulting evolution of the magnetic properties have been investigated by SQUID magnetometry, Mössbauer Spectroscopy and Ferromagnetic Resonance. The largest magnetoresistance amplitudes at room temperature have been obtained for a magnetic concentration x around 36 at.% in both as-deposited and annealed samples. Amplitudes $\Delta R/R(H=0)$ of 15% in the as-deposited samples and 21% in samples annealed at 600K for 10 minutes have been observed at room tem-

We report on structural, magnetic and transport properties of $(Co_{70}Fe_{30})_x Ag_{1-x}$ heterogeneous alloys, with

peratures. At 4K these amplitudes reach at 43% (equivalent to $\Delta R/R(H=2T)=75\%$).

Ferromagnetic Resonance of Fe (111) Thin Films

REZENDE, S. M.; MOURA, J. A. DE S.; AGUIAR, F. M. DE

Departamento de Física-UFPE
SCHREINER, W.
Instituto de Física-UFRGS

Ferromagnetic resonance (FMR) is one of the most powerful techniques for determining the crystallinity of a material and for measuring the phenomenological anisotropy constants. It has been used to characterize Fe crystal films and Fe/Cu multilayers epitaxially grown on Si(111) by electron beam deposition. Resonance field data as a function of the field orientation in the film plane for several samples show that Fe films and Fe/Cu multilayers grow epitaxially on Si (111) with excellent crystallinity with the [111] orientation. It is shown that the (111) plane is unique among the principal planes in cubic crystals, allowing precise measurements of the small second-order and in-plane anisotropies as well as misorientations from the crystal plane.

INTERDIFUSÃO E MODIFICAÇÃO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FILMES FINOS Ag/Ni/Ag INDUZIDAS POR IMPLANTAÇÃO DE ARGÔNIO.

SANTOS, C. A. DOS; MOURA, C. S.; AMARAL, L.; SCHREINER, W. H.

Instituto de Física - UFRGS
REZENDE, S. M.; MOURA, J. A. S.; AGUIAR, F. M. DE

Departamento de Física - UFPE

Filmes finos e multicamadas magnéticas têm despertado grande interesse desde o momento em que esses materiais passaram a ser fabricados. Nos últimos anos, com as descobertas de novas propriedades, e as possibilidades de aplicações tecnológicas, o interesse tem aumentado consideravelmente. O sistema Ag/Ni apresenta algumas peculiaridades interessantes: (i) sendo imiscíveis, esses elementos podem proporcionar a fabricação de filmes e multicamadas com superfícies ab-

ruptas; (ii) por outro lado, a imiscibilidade é diretamente proporcional à baixa interdifusividade; (iii) multicamadas Ag/Ni apresentam o fenômeno da magnetoresistência gigante. Na presente comunicação, resultados preliminares são apresentados, na tentativa de se estabelecer uma possível correlação entre o processo de interdifusão e as modificações das propriedades magnéticas do sistema em pauta. Três amostras do tipo Ag(300 Å)/Ni(200 Å)/Ag(100 Å) foram simultaneamente preparadas em temperatura ambiente, e em alto vácuo ($P \approx 10^{-8}$ mbar) através da evaporação de Ag e Ni, provocada por feixe de elétrons. Na sequência cada amostra foi submetida a um dos seguintes tratamentos: (1) implantação com 10^{14} Ar^+ . cm^{-2} , a 100 keV; (2) implantação com 10^{16} Ar^+ . cm^{-2} , a 100 keV; (3) implantação como descrita em (2), seguida de recozimento a 400 C, sob vácuo, durante 15 minutos. Difração de raios X sugere que as camadas de Ni e de Ag apresentam grande textura na direção (111), e que essa estrutura não é modificada por qualquer dos tratamentos acima. Todavia, análise realizada com espalhamento Rutherford (RBS) sugere fortemente a existência de interdifusão nas amostras submetidas aos tratamentos (2) e (3). Resultados obtidos com ressonância ferromagnética (FMR) também sugerem a existência de interdifusão, na medida em que o decréscimo no valor de $4\pi M_{eff}$, experimentalmente observado, possa ser correlacionado com algum tipo de mistura nas interfaces. Um resultado interessante foi obtido com a amostra submetida ao tratamento (1). De acordo com RBS, esse tratamento não provoca qualquer alteração, na amostra virgem. No entanto, o valor de $4\pi M_{eff}$, obtido via FMR, é ligeiramente superior ao valor da amostra virgem, aproximando-se do valor obtido para um filme isolado de Ni. É possível que se tenha, nesse caso, o processo de retro-difusão, já relatado para outros sistemas imiscíveis.

Multicamadas e Filmes Magnéticos II
(MMM) - 10/06/94

Magnetic Metallic Multilayers

FALICOV, L. M.

Dept. of Physics, Univ. of California at Berkeley and Materials Sciences Division, Lawrence Berkeley Lab., Univ. of California

Electronic, magnetic and transport properties of metallic magnetic multilayers will be discussed. In particular, ferromagnetic-normal-metal systems are of great current interest. They exhibit an oscillatory (from parallel to antiparallel) coupling of successive ferromagnetic layers as a function of the normal-metal spacer thickness. The structure depends sensitively on sample and interface preparation and thermal treatment. These systems also exhibit a giant negative magnetoresistance, which is of considerable scientific and technological importance, in particular

as an application to magnetic reading heads. A variety of beautiful experiments will be described, and the state of the art in the theory of the electronic and magnetic structures and the magnetoresistance will be presented.

RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA EM FILMES DE YIG

SILVA, F. C. S. DA; MOURA, J. A. S.; AGUIAR, F. M. DE; AZEVEDO, A.; REZENDE, S. M.
Departamento de Física, UFPE

Experimentos de ressonância ferromagnética (FMR) de alta potência têm sido realizados quase sempre em amostras volumétricas [1] onde um número grande de modos são elegíveis para excitação, dificultando a análise da dinâmica do sistema. Neste trabalho apresentamos resultados de FMR em banda X em filmes finos de YIG com espessuras d variando no intervalo $0.5 \mu\text{m} < d < 100 \mu\text{m}$, apresentando uma densidade discreta de modos normais. Os modos observados em regime de baixa potência são identificados de acordo com a teoria de Sparks [2] para as ressonâncias paralela e perpendicular. Os parâmetros obtidos são então utilizados na análise das auto-oscilações observadas em regime de alta potência. [1] F.M. de Aguiar, A. Azevedo and S.M. Rezende, *Braz. J. Phys.* 22, 301 (92). [2] M. Sparks, *Phys. Rev. B* 1, 3831 (1970).

DEPOSITION OF GARNET THIN FILMS FOR MAGNETO-OPTIC RECORDING BY METALLO-ORGANIC DEPOSITION

AZEVEDO, A.
Dept. de Física - UFPE, Recife.
KRYDER, M. H.
DSSC - Carnegie Mellon University, Pittsburgh USA.

Bismuth substituted rare-earth iron garnet films have been prepared by Metallo-organic Decomposition (MOD). Traditionally these materials have been deposited by liquid phase epitaxy and rf magnetron sputtering. MOD has a number of advantages over sputtering including absence of vacuum, low cost and easy control of composition. Metal carboxylates have been used as the metallo-organic precursors. The metal carboxylates were synthesized by reacting aqueous solutions of the metal nitrates with ammonium 2-ethylhexanoate. The carboxylates were then dissolved in a solvent of a propionic acid/amine mixture. This solution was diluted with Xylene or Toluene for spin coating. The films were deposited by spin coating onto glass substrates, pyrolyzed on a hot plate at temperatures around 400°C , and then heat treated in air in a quartz tube furnace at temperatures around 670°C for three hours. Smooth and uniform films with general composition $R_{3-x}Bi_xFe_{5-y}Ga_yO_{12}$ (where R is Gd or Dy) were obtained. Garnet single phase films were measured by X-ray diffractometry and the film smoothness was carried out by optical interferometry. This method looks quite

promising as a technique for fabricating magneto-optic recording disks.

MAGNETORESISTANCE IN (NiFe/Cu/Co/Cu) MULTILAYERS

PEREIRA, L. G.
IFRGS
MOREL, R.; LOTTIS, D.; FERT, A.
Laboratoire de Physique des Solides, Orsay, France
JAQUET, J. C.; VALET, T.
LCR Thomson CFS, Orsay, France.

We have performed a study of the variation of the magnetoresistance in $[NiFe_{80}Fe_{20}/Cu/Co/Cu]$ multilayers with the thickness t_{NiFe} , t_{Co} and t_{Cu} of each type of component layer. The dependence of the MR on t_{Cu} indicates the presence of an oscillatory interlayer exchange coupling through the Cu. The phase and period are found to be similar to those previously measured in Co/Cu and $NiFe/Cu$ multilayers. However, the existence of a strong contrast in coercitive fields between $NiFe$ and Co leads to a significant magnetoresistance for Cu layer thickness where coupling is zero or even moderately ferromagnetic. The magnetoresistance (MR) at $4.2K$ is larger than 25%.

MAGNETORESISTÊNCIA ac GIGANTE E RELAXAÇÃO TEMPORAL EM LIGAS FERROMAGNÉTICAS AMORFAS

MARTINS, C. S.; MACHADO, F. L. A.; REZENDE, S. M.
Departamento de Física - UFPE

Magnetoresistência Gigante (GMR) tem sido bastante estudado em multicamadas e materiais granulares. No presente trabalho apresentamos medidas de magnetoresistência (MR) a temperatura ambiente em ligas amorfas ferromagnéticas $Fe_{75-x}Co_xSi_{15}B_{10}$ para $x = 2.5, 4.6, 6.5$. o campo magnético de aplicado longitudinalmente foi variado de 0 a $\pm 40Oe$. Estudamos também a dependência da MR com a frequência no intervalo de $0.1Hz < f < 1MHz$. O valor do pico da MR varia entre valores típicos de 0.72% em baixas frequências até valores tão grande quanto 131% a $1MHz$. Observamos ainda um decaimento temporal da magnetoresistência. Este valor típico de GMR não foi observado nas ligas com $x = 0.25$ e $x = 6.5$. Estas ligas demonstram um grande potencial para aplicações em memórias magnetoresistivas de acesso aleatório (MRAM). Trabalho financiado parcialmente pelo CNPq, FACEPE e FINEP/PADCT.

*Magnetismo II (MMM) - 10/06/94***CINÉTICA DE CRESCIMENTO DE FASES EM BICAMADAS POR INTERDIFUSÃO.**

GARCIA, V. H.

Departamento de Física, Univ. do Estado de Sta. Catarina Campus Universitário-Joinville, SC

MORS, P. M.; SCHERER, C.

Instituto de Física, Univ. Fed. do Rio Grande do Sul

Durante a interdifusão de dois metais a uma dada temperatura, cada fase presente no diagrama de equilíbrio do sistema binário é formada na zona de difusão. As observações experimentais do crescimento isotérmico de fases em camadas intermediárias nos sistemas binários mostram que, tanto a posição das interfaces quanto a espessura dessas camadas formadas por difusão, geralmente variam com $t^{1/2}$. Contudo, esta lei é válida para pares de difusão grandes ("infinitos"). No caso de bicamadas finitas tais como, por exemplo, filmes finos, tal regra não é sempre observada. Através da solução numérica da equação da difusão, usando uma difusividade dependente de concentração, descrevemos a cinética de crescimento das camadas de fases em uma bicamada devido à interdifusão. Em sistemas finitos, onde há suprimento limitado de material em uma ou em ambas as camadas iniciais, os cálculos mostram que as espessuras das camadas de fases não variam com $t^{1/2}$. Dentro dos limites das aproximações do modelo, a comparação com resultados experimentais mostrou-se muito boa.

MAGNETIC STRUCTURE OF THE PEROVSKITE $YBaCuFeO_{5+\delta}$.

MOMBRÚ, A. W.

Univ. de la República - Uruguay

CHRISTIDES, C.; LAPPAS, A.; PRASSIDES, K.

Univ. of Sussex - United Kingdom

PISSAS, M.; MITROS, C.; NIARCHOS, D.

NCSR "Demokritos" - Greece

The magnetic and crystal structures of the oxygen-deficient layered perovskite $YBaCuFeO_{5+\delta}$ have been determined with powder neutron diffraction methods. It crystallises in the non-centrosymmetric tetragonal space group $P4mm$ with $a = 3.8707(2)$ Å and $c = 7.6711(4)$ Å (at room temperature). Structural motifs of corner-sharing severely elongated CuO_5 ($Cu-O_{eq} = 1.936(2)$ Å, $Cu-O_{ax} = 2.35(9)$ Å) and slightly squashed FeO_5 ($Fe-O_{eq} = 2.03(3)$ Å, $Fe-O_{ax} = 1.82(9)$ Å) square pyramids result in a novel lamellar structure with ordered oxygen defects. Local magnetic moments directed perpendicular to the unique axis ($\mu = 2.51(15)$ μ_B and perpendicular to c axis, at room temperature) appear at the Fe^{3+} sites at 442.4(5) K. The magnetic unit cell results by doubling the chemical one along all

three crystallographic directions (magnetic propagation vector, $k = (1/2, 1/2, 1/2)$). Despite the long separation between successive FeO_2 layers (approx. 7.7 Å), the magnetic behavior can be successfully described by a three-dimensional Heisenberg spin Hamiltonian with a critical exponent $\beta = 0.366(8)$. No evidence of ordering of the Cu sublattice is found on cooling to room temperature.

Determinação da orientação magnética de fitas e multicamadas via espectroscopia Mössbauer.

BORGES, J. F. M.; TIMM, C. A.; COSTA JR, M. DA

Instituto de Física - UFRGS

A orientação do eixo fácil de magnetização de uma fita magnética é convencionalmente medida pelo parâmetro de "squareness" ou quadratura S , que é a razão da magnetização remanente pela magnetização de saturação, e pela taxa de orientação (OR), que é a razão entre o "squareness" paralelo, ou seja, com o campo magnético aplicado paralelamente a direção de gravação da fita magnética, e o "squareness" transversal que se obtém com o campo magnético aplicado transversalmente a direção de gravação da fita. No nosso trabalho, determinamos a orientação do eixo fácil de magnetização de fitas magnéticas, (Fe_2O_3), através da espectroscopia Mössbauer, usando para isso a razão das intensidades das diferentes linhas. Aplicamos também a técnica de determinação do eixo fácil de magnetização via espectroscopia Mössbauer para determinar o eixo de magnetização de multicamadas magnéticas, monocristalinas crescidas sobre substratos de silício com orientação (111). Usamos como amostras, camadas magnéticas de 15 Å de ferro espaçadas por camadas não magnéticas de cobre, molibdênio, neodímio ou prata, também com espessuras de 15 Å, todas crescidas por um método de deposição via evaporação por canhão de elétrons, e uma pressão de base de 10^{-9} torr à temperatura ambiente. As fitas magnéticas foram medidas por um sistema Mössbauer de transmissão e as amostras na forma de multicamadas foram medidas através de um sistema Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS) com fluxo de gás, hélio metano, constante. Este trabalho foi parcialmente financiado pelas agências: CNPQ, FINEP e FAPERGS.

ANÁLISE TÉRMICA DE SMITH APLICADA AO SISTEMA $AgCu$

HOYOS, F. J. DE; GAMA, S.; RIBEIRO, C. A.

UNICAMP

Utilizando um Forno de Lâmpadas, aplicou-se o método de *Análise Térmica de Smith* (um tipo de análise térmica) para algumas composições do sistema $AgCu$. O Forno de Lâmpadas é constituído de 6 espelhos elípticos com lâmpadas de halogênio nos focos que, hexagonalmente dispostos, concentram a luz na

amostra colocada no centro. Praticamente sem inércia térmica, o forno utiliza amostras em torno de 0,5g e permite uma análise térmica com alta sensibilidade. A análise térmica é feita em atmosfera de Argônio e a amostra é envolvida em folha de Tântalo. Os resultados revelam que ocorre uma reação inesperada durante a fusão da amostra, na região de duas fases líquido-sólido, tanto para as ligas ricas em Prata como para as ricas em Cobre. O mesmo não se observa para as composições em torno do eutético. Microscopia Óptica e Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM) são usadas para verificar se a reação observada está envolvendo o Tântalo. (Apoio FAPESP/CNPq).

ESTUDO MÖSSBAUER DO EFEITO DE IMPUREZAS EM MAGNETITAS NATURAIS

BRÜCKMANN, M. E.; SIMON, G.; COSTA JR, M. I.

DA

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Tem sido realizados estudos a fim de se determinar os efeitos de impurezas, tais como Ti, sobre as propriedades magnéticas de magnetitas naturais. São apresentados resultados preliminares de Espectroscopia Mössbauer, acima e abaixo da temperatura de Verwey(1,2), para uma magnetita natural obtida de uma rocha supostamente de origem extra-terrestre (3). As medidas a baixa temperatura (nitrogênio líquido) foram realizadas sem a aplicação de campo magnético externo, diferentemente de muitos resultados encontrados na literatura(4). Com isto pretendemos fazer uma comparação entre medidas à baixas temperaturas com e sem campo externo aplicado(5) e entre medidas de magnetitas artificiais e naturais salientando os efeitos gerados por impurezas.

(1) R. Bauminger et al, Physical Review 122, 5 (1961).

(2) A. Ito, K. Ôto and Y. Ishikawa, J. P. Soc. Japan 18, 10 (1963).

(3) R. P. Livi, C. Carraro e M. Ribeiro, Rev. Bras. Geofísica 5 (1987) 63.

(4) R. S. Hargrove and W. Kündig, Solid State Comm. 8 (1970).

(5) Greenwood and Gibb, "Mössbauer Spectroscopy", London, Chapman and Hall, 1971.

Trabalho parcialmente financiado por: CNPq, FINEP, PROPEP, FAPERGS.

IMPUREZAS DE Co EM Mo E LIGAS DE

$Nb_{1-x}Mo_x$.

NOGUEIRA, R. N.; PETRILLI, H. M.

IFUSP

Neste trabalho, estudamos o comportamento magnético de impurezas substitucionais de Co nos metais Mo e Nb e ligas de $Nb_{1-x}Mo_x$. Resultados experimen-

tais da literatura mostram que o Co como impureza substitucional em Mo apresenta momento magnético, mas não o apresenta em Nb. Outros resultados experimentais mostram que o aparecimento ou não do momento magnético no Co em ligas $Nb_{1-x}Mo_x$ depende da concentração destes metais. O método RS-LMTO-ASA (real space - linear muffin-tin orbital - atomic sphere approximation) é um método de primeiros princípios dentro da aproximação de densidade local, e tem sido utilizado com sucesso^{1,2} para descrever o comportamento magnético de ligas diluídas de metais de transição. Utilizando este método, calculamos os sistemas MoCo e NbCo (impureza substitucional de Co em hospedeiros Mo e Nb respectivamente). Nossos resultados se mostraram em excelente acordo com os resultados experimentais. Iniciamos também o estudo da liga $Nb_{1-x}Mo_x$, realizando um cálculo em que duas impurezas, sendo um Co e um Nb, são colocadas substitucionalmente em Mo para observar o comportamento magnético do Co.

[1] H. M. Petrilli, S. Frota-Pessoa, Phys. Rev. B, 48, 7148 (1993)

[2] S. Frota-Pessoa, L. A. de Mello, H. M. Petrilli, A. B. Klautau, Phys. Rev. Lett., 71, 4206 (1993)

Trabalho financiado pela FAPESP e CNPq

SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA E RESISTIVIDADE ELÉTRICA DE LIGAS DE Cr-V NO ENTORNO DA TRANSIÇÃO DE NÉEL

OLIVEIRA, A. J. A. DE; ORTIZ, W. A.

Grupo de Supercondutividade e Magnetismo - Depto. de Física, Universidade Federal de São Carlos

CAMARGO, P. C. DE; GALKIN, V. Y.

Departamento de Física - Universidade Federal do Paraná - 81531-970 Curitiba - PR - Brasil

Efetamos medidas de suscetibilidade complexa AC ($\chi' + i\chi''$) em função da temperatura em amostras $Cr - x\%V$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.67, 1.0, 1.5$). Para as amostras com $x = 0.2$ e 0.4 , a parte real, que corresponde à suscetibilidade diferencial, exibe um salto abrupto nas vizinhanças da Temperatura de Néel (T_N), seguido por um comportamento de Curie-Weiss (CW). A amostra com $x = 0.1$ não exibe o salto, mas também segue uma Lei de CW acima de T_N . Nas demais concentrações, o comportamento de CW não é observado, e χ' apresenta-se como no Cr. O comportamento tipo CW na fase paramagnética, recentemente confirmado por Hill et al^[1] através de medidas de suscetibilidade DC utilizando um SQUID, é indicativo da presença de momentos magnéticos localizados. A parte imaginária $\chi''(T)$ está relacionada diretamente com a resistividade elétrica, e possibilita a determinação de T_N . Observamos que o estabelecimento dos momentos magnéticos localizados ocorre cerca de 5 K acima de T_N . Os re-

sultados serão discutidos a partir de dois modelos. O de Tugushev^[2] prevê o aparecimento de momentos magnéticos localizados com impurezas não-magnéticas em ligas de Cr, a partir da formação de uma "SDW local". O modelo de Hattox et al^[3] mostra que momentos magnéticos localizados podem aparecer em torno dos íons de Vanádio, quando estes estão suficientemente afastados, via interação de exchange. [1] - P.Hill, N.Ali, A.J.A. de Oliveira, W.A. Ortiz, P.C. de Camargo and E.Fawcett - Journal of Physics: Condensed Matter - to published in march/94 [2] - V.V. Tugushev - Electronic Phase Transitions, 237 Elsevier Scien Publishers, B.V. (1992) [3] - T.M. Hattox, J.B. Conklin, J.C. Slater and S.B. Trichy - J.Phys. Chem. Solids - 34 - 1627 (1973)

Autovalores de Hamiltonianos de Campo Cristalino de Simetria Hexagonal e Tetragonal: Resultados Analíticos Via Computação Algébrica.

SOBRAL⁺, R. R.; GUIMARÃES⁺⁺, A. P.; SILVA, X.
A. DA
CBPF/CNPq

Os autovalores do Hamiltoniano de Campo Cristalino são obtidos normalmente a partir da diagonalização numérica. Recentemente apresentamos expressões analíticas (em função dos parâmetros B_4 e B_6 do Campo Cristalino) para os autovalores do Campo Cristalino de simetria cúbica (aceito para publicação no J. Magn. Mat.; ver também R R Sobral et al em J. Phys. Condens. Matter 5 (1993) L671.). No presente trabalho são apresentadas pela primeira vez expressões analíticas para os autovalores do Campo Cristalino de simetria Hexagonal e Tetragonal. Estes resultados são importantes na interpretação do espalhamento inelástico de nêutrons, propriedades magnéticas, calor específico etc. em compostos intermetálicos de terras-raras. Os resultados são obtidos por procedimentos de computação algébrica, que permitem fatorar o polinômio característico associado ao Hamiltoniano de Campo Cristalino. ⁺ bolsista RD do CNPq; ⁺⁺ atualmente no MIT, Cambridge MA 02139, USA.

Processos e estados de magnetização em películas epitaxiais de granadas de ferro e ítrio
CAMPOS, A. A. G.; ABRAS, A.; PERSIANO, A. I. C.
UFMG

Processos e estados de magnetização em películas epitaxiais de granadas de ferro e ítrio dotadas ou não com bismuto são estudados utilizando as técnicas de Espectroscopia Mössbauer, Magnetometria e Ressonância Magnética Nuclear. Medidas da direção da magnetização para diferentes campos magnéticos exter-

nos, aplicados perpendicular ao plano da película revelaram que a magnetização pode ocorrer tanto por rotação dos domínios magnéticos quanto por movimentação das paredes separando estes domínios. O processo de magnetização por rotação em películas contendo bismuto apresenta, para um determinado valor do campo externo, um súbito reaparecimento de paredes separando os domínios o que é acompanhado por um salto da magnetização na direção normal à superfície. Procura-se esclarecer este fenômeno tendo em vista uma configuração de domínios que minimizaria a energia magnética da película. Espectros Mössbauer por detecção de Raios-X espalhados nestas películas revelam uma direção não esperada para a magnetização na ausência de campo magnético externo.

SIZE AND ANISOTROPY EFFECTS IN THE MAGNETIC PHASES OF ANTIFERROMAGNETIC SUPERLATTICES
DANTAS, A. L.; CARRIÇO, A. S.
UFRN

We present a study of the magnetic phases of antiferromagnetic superlattices at low temperatures. The magnetic structure is represented by a unit cell containing $m(n)$ layers of magnetic moments of two different uniaxial antiferromagnets and various compositions ((m/n)) are considered. Under the influence of an external field, the magnetic phase is found using a self-consistent effective field model which allows the spin system to adapt itself to the composition and interlayer coupling of the superlattice. $\text{FeF}_2/\text{MnF}_2$ (m/n) superlattices were chosen to apply the model because of the large difference of the components anisotropies. We found that by increasing the external field the superlattice undergoes a transition from the antiferromagnetic (AF) phase to a twisted (T) phase that is largely due to the influence of the low anisotropy component. This phase changes continuously to a normal spin-flop configuration as the field is increased beyond the critical value at which the AF state is unstable. The critical field for this transition (T-phase) varies as the composition of the SL is modified and reaches the bulk MnF_2 spin-flop field if n is made large enough. The SL transition field is below the FeF_2 spin-flop field and above the MnF_2 value. Comparison with similar calculations for free-surface films indicates that the presence of the strong interface coupling suppresses the low field surface-spin-flop transition predicted previously for low anisotropy antiferromagnets.

**Relaxação spin-spin e spin-fônon em
 $LiNbO_3$: $^{57}Fe(III)$ por Espectroscopia
Mössbauer**

PFANNES, H. -D.

UFMG

BILL, E.; TRAUTWEIN, A. X.

*Institut für Physik, Medizinische Universität zu Lübeck,
Alemanha*

MAGALHÃES-PANIAGO, R.

University of Houston, USA

A partir de espectros Mössbauer, sob campos externos de 4,92 T e 6,2 T, de monocristais de Niobato de Lítio, dopados com ^{57}Fe (Fe(III)-alto spin) determinamos parâmetros de campos cristalino e hiperfinos. Ajustes usando a integral de transmissão indicam que os níveis eletrônicos do Fe(III) são populados segundo uma distribuição de Boltzmann com uma temperatura de spin igual a da amostra. Espectros obtidos em 4,2 K, sob campos externos de 0T e 19mT, foram satisfatoriamente simulados usando um spin efetivo igual a 1/2, fatores-g calculados usando valores esperados do spin eletrônico e um campo magnético interno médio de 5,5 mT inclinado em 20 graus relativo ao eixo c do cristal. Este campo substitui a distribuição de campos oriundos de núcleos de Nb e Li efetivos nos elétrons do Fe ("cross-relaxation"). A análise de espectros sob campos da ordem de 1,5 T e temperaturas maiores que 100 K indica a presença de relaxação spin-fônon através de um processo direto.

**Propriedades Magnéticas e Estruturais de
Ferritas Ni-Zn em Função do Processo de
Fabricação**

MACEDO, C. V.; PFANNES, H.; MOHALLEM, N. D.
S.

UFMG

CARVALHO, E. G. DE

CETEC-MG

O CETEC-MG a alguns anos vem desenvolvendo um projeto de pesquisa em ferrimagnetos cerâmicos de composição nominal $(NiO)_{0,5}(ZnO)_{0,5}(Fe_2O_3)$. Ao contrário do processo de fabricação até agora usado no CETEC, a síntese hidrotermal, usamos a síntese por coprecipitação, que beneficia o produto através de tratamento térmico por calcinação. Descobrimos parâmetros termodinâmicos da calcinação que levam a um produto final com melhores propriedades macroscópicas. Para tanto, foram feitas análises de absorção atômica, correlação de fótons, difração de raios-X, espectroscopia Mössbauer, termodiferencial, termogravimétrica, medidas indiretas de tamanho de cristalito, medidas de variação de massa e testes de síntese, compactação e sinterização.

**OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE
FILMES FINOS DA FASE $Fe_{17}Nd_2$.**

URBANO, A.; GAMA, S.; RIBEIRO, C. A.;

SCARMINIO, J.; LAMBERT, C. S.

UNICAMP

As fases $Fe_{17}R_2$, (R=terras raras), apresentam interesse acadêmico e tecnológico por causa da possibilidade de obter boas propriedades magnéticas sob absorção de várias substâncias, como H, C e N. Na forma de filmes finos, apresentam também grande interesse para aplicação como meios de gravação magnética. O presente trabalho mostra resultados de testes da obtenção de filmes finos da fase $Fe_{17}Nd_2$ obtidos pela técnica de evaporação relâmpago, (flash evaporation). O material original (bulk) é obtido por fusão em forno a arco seguido de tratamento térmico a 1100°C por 200hs. A amostra é reduzida a pó e evaporada em barca de tungstênio previamente aquecida a 2000°C sob vácuo de 10^{-6} mbar. Os filmes obtidos são uniformes e amorfos. A fase é obtida por tratamento térmico em forno de lâmpadas com atmosfera inerte. Os filmes assim obtidos são caracterizados por difração de raios-X, por microscopia eletrônica e por medidas de magnetização, paralelamente ou perpendicularmente ao plano do filme.

**Efeito de Rugosidade de Interface no
Acoplamento de Troca em Multicamadas
Metálicas Magnéticas**

COSTA JR, A. T. DA; MUNIZ, R. B.

Universidade Federal Fluminense

O efeito da presença de rugosidades na interface sobre o acoplamento de troca entre camadas magnéticas metálicas separadas por um metal não magnético é estudado. A abordagem baseia-se em uma expressão geral para o acoplamento recentemente derivada (Ferreira, M. S.: Tese de Mestrado; Ferreira, M. S., Muniz, R. B., Castro, J. A.: "On the Theory of the Exchange Coupling in Magnetic Metallic Multilayers" submetido para publicação). Cálculos existentes para o acoplamento entre dois planos magnéticos metálicos separados por um metal não magnético em função da distância entre os planos consideram apenas interfaces perfeitas. Para simular o efeito de rugosidade em escala atômica na interface, calculamos a variação do acoplamento devido à presença de impurezas magnéticas diluídas, localizadas no metal espaçador e adjacentes a um dos planos magnéticos. Resultados são apresentados para as variações nos termos bilinear e biquadrático do acoplamento, em função da distância entre os planos magnéticos.

Acoplamento de troca em sistemas magnéticos metálicos

BARBOSA, A. C. DE C.; COSTA, M. V. T.; MUNIZ, R. B.; CASTRO, J. D. E

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - UFF

O entendimento do comportamento da interação de troca em sistemas magnéticos metálicos pode desempenhar um papel fundamental para o conhecimento da fase de maior estabilidade magnética que ocorre em diversos sistemas. Um outro ponto relevante, é a determinação de como o comportamento desse acoplamento é afetado com a dimensionalidade do sistema. Neste trabalho procuramos determinar o perfil do acoplamento magnético em diversos sistemas de multicamadas de metais de transição. A determinação desse acoplamento, é feita primeiramente através do cálculo da variação de energia eletrônica total, em termos dos propagadores monoelétrônicos *, devido à rotação da magnetização de uma plano ferromagnético de um ângulo arbitrário Θ , em contato com a superfície de um sistema semi-infinito também ferromagnético. Calculamos a variação do acoplamento considerando a rotação da magnetização em apenas um dos átomos constituintes do plano. Consideramos também a situação em que o plano que sofre a rotação em sua magnetização encontra-se no volume do sistema.

(*) M. S. Ferreira, Tese de Mestrado - UFF (1993)

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DOS COMPOSTOS INTERMETÁLICOS (Er,Tb)M₂ PARA M=Co E Ni

TAKEUCHI, A. Y.; GARCIA, F.; CUNHA, S. F. DA
CBPF

Os compostos de terra rara RCo₂, fases de Laves de estrutura cúbica são bastante apropriados para o estudo do magnetismo de metais 3d e 4f. Dependendo das propriedades magnéticas da terra rara podemos ter um momento induzido no Co e uma transição ferromagnética. Para R=Dy, Ho ou Er esta transição é de primeira ordem [1] enquanto que para R=Gd e Tb é de segunda ordem. Este comportamento está sendo observado, através de medidas de resistividade elétrica e de magnetometria, em função da concentração no sistema (Er,Tb)Co₂ onde estudamos a influência do campo interno dos vizinhos de R mais próximos no Co. Trata-se de um sistema cúbico com parâmetro de rede crescendo linearmente com a concentração de Tb. Observou-se que pequena quantidade de Tb em ErCo₂ muda a transição de primeira para segunda ordem. Medidas de magnetização DC de amostras resfriadas com campo magnético aplicado e sem campo aplicado dão curvas diferentes à temperaturas menores que T_c. Tendo em

vista a importância da localização da energia de Fermi em relação a densidade de estados da banda 3d, uma comparação com os compostos (Er,Tb)Ni₂ é feita. Nestes compostos todas as transições são de segunda ordem.

[1] E. Gratz et al, Journal de Physique C5 40 C5-186 (1979)

ESTUDO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DO ACOPLAMENTO MAGNÉTICO ENTRE CAMADAS AMORFAS GdCo₂/YCo₂

TRIBUZY, C. V.

CBPF

ALIAGA-GUERRA, D.

Facultad de Ciencias-Universidad Nacional de Ingenieria- Lima, Perú

SANTOS, A. D. DOS

USP

GUIMARÃES, A. P.

CBPF; Endereço atual: MIT, Cambridge 02139, EUA.

As camadas magnéticas amorfas do tipo RM (terra rara-R, metal de transição-M) são de muito interesse tecnológico por seu uso em dispositivos de armazenamento magneto-ótico de dados devido a forte anisotropia perpendicular ao plano dos filmes. As multicamadas produzidas artificialmente a base de filmes finos amorfos apresentam propriedades magnéticas, estruturais e de transporte muito interessantes. Um problema importante é a caracterização da estrutura atômica e magnética da interface que determina o comportamento físico do material. A RMN, baseada na sensibilidade da interação hiperfina entre os primeiros vizinhos dos núcleos observados, permite o estudo desta interface. Apresentaremos um estudo da distribuição de campos hiperfinos em filmes amorfos $a-GdCo_2$ e $a-YCo_2$ com 2500Å e na bi-camada $GdCo_2/YCo_2$ com 437Å/400Å através das ressonâncias do ⁵⁹Co, ⁸⁹Y, ¹⁵⁵Gd e ¹⁵⁷Gd. Em $a-YCo_2$ observamos ressonâncias de dois sítios magnéticos de ⁵⁹Co que, ao contrário do YCo_2 cristalino, é um composto magnético. Também observamos uma ressonância que poderia atribuir-se aos núcleos de ⁸⁹Y. No filme $a-GdCo_2$ registramos um sinal que se distribui numa faixa de 35 a 95 MHz centrada ao redor de 62 MHz, que corresponde à ressonância do $GdCo_2$ cristalino. Estes estudos preliminares feitos nos filmes $a-GdCo_2$ e $a-YCo_2$ permitirão um estudo mais preciso da bi-camada $GdCo_2/YCo_2$ na qual, em medidas iniciais, observamos a ressonância do ⁵⁹Co.

**INTERAÇÕES HIPERFINAS
TRANSFERIDAS EM $Dy_xY_{1-x}Fe_2$, ATRAVÉS
DA RMN *DO ^{89}Y .**

SARTHOUR, R.

CBPF

ALVES, K. M. B.

Departamento de Física e Química da UFES

GUIMARÃES[†], A. P.

CBPF

Realizamos medidas de interações hiperfinas transferidas utilizando a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) do ^{89}Y nos compostos intermetálicos $Dy_xY_{1-x}Fe_2$, fases de Laves com estrutura C15. As medidas foram feitas a 4,2 K, e os espectros obtidos varrendo automaticamente as frequências e registrando a intensidade do eco de spin em cada ponto. O estudo se baseou nas seguintes concentrações de Dy ($x = 0,005; 0,0075; 0,01; 0,0125; 0,015; 0,02$). Essas medidas apresentam uma séria dificuldade, pois a presença dos átomos de Dy reduz fortemente a mobilidade das paredes de domínios, o que torna muito fracos os sinais de RMN. Os espectros foram analisados em termos de diferentes configurações de vizinhos do átomo sonda de Y . Concluímos que: a) há um aumento do campo hiperfino médio, que é dado pelo baricentro do espectro de RMN com x (concentração de Dy), b) as linhas do espectro de RMN se alargam à medida que x aumenta e c) não aparecem no espectro as linhas que têm contribuições do campo hiperfino direto; por exemplo, a linha correspondente à configuração de um átomo sonda de Y com um vizinho de Dy na primeira camada de vizinhos R não é vista no espectro. Isto ocorre porque o Dy imobiliza as paredes de Bloch e portanto a linha de ressonância de um Y que tem na primeira camada de terras raras átomos de Dy , não é vista no espectro de RMN.

+ Endereço atual: MIT, Cambridge 02139, EUA.

**BI-CAMADAS FERRIMAGNÉTICAS
MACROSCÓPICAS DE Y-Co/Gd-Co**

YONAMINE, T.; SANTOS, A. D. DOS; MISSELL, F. P.
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo,
Brasil*

O sistema de multi-camadas amorfas de Y-Co e Gd-Co tem sido objeto de estudo em nosso laboratório. Alguns resultados experimentais para a bi-camada Y-Co/Gd-Co produzidas por um canhão eletrônico eletrostático serão apresentados, bem como a modelização teórico deste sistema. O comportamento magnético desta bi-camada é obtido usando-se um magnetômetro à efeito Kerr, enquanto que para o controle de espessura e composição das camadas usamos a técnica do RBS. Observamos uma transição macroscópica ferri-ferromagnética em campos magnéticos, H_t , entre 30 Oe e alguns kOe, dependendo das espessuras de cada camada. Esta

transição corresponde ao aparecimento de uma parede de domínios paralela à interface, a qual apresenta espessura variável, em função da intensidade do campo magnético aplicado. A modelização dessa parede de domínios, bem como do comportamento macroscópico da bi-camada, vem sendo desenvolvida com base na energia magnetostática e de anisotropia magnética de cada camada e na interação de "exchange" dos pares atômicos Co-Co. A partir desse modelo podemos prever o valor de H_t , da espessura da parede de domínio e sua posição relativa à interface. Uma comparação entre os resultados experimentais e teóricos será apresentada. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

**ESTUDO DO COMPORTAMENTO
MAGNETO-ÓPTICO DE UMA REDE DE
DIFRAÇÃO MAGNÉTICA**

SANTI, C. E.; SANTOS, A. D. DOS

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

PEREIRA, J. A. A. M.

Laboratório de Microeletrônica, EPUSP

Estamos realizando o estudo do comportamento magneto-óptico de redes de difração magnética. A rede de difração é produzida depositando-se o material magnético sobre uma máscara de "photoresist" produzida por litografia óptica, sobre um substrato de Si. O processo de evaporação utilizado é por feixe eletrônico eletrostático. Foram produzidas amostras com duas configurações básicas: 1. Rede de difração unidimensional, constituída de tiras magnéticas (filmes finos) depositadas sobre um substrato de Si. 2. Rede de difração bi-dimensional, constituída de partículas magnéticas quadradas, sobre substrato de Si. Em ambos os casos o período da rede é o dobro da dimensão da partícula ou tira magnética, a qual se situa na faixa de 10 a 50 μm . Como material magnético é utilizado o Co, por possuir propriedades magnéticas e ópticas bem conhecidas. Os filmes magnéticos têm espessura de 1000 Å, de maneira a se evitar o aparecimento do sinal refletido no substrato. Verificamos a necessidade de se esfriar o substrato à nitrogênio líquido, para preservar a máscara de "photoresist". Uma camada de aproximadamente 400 Å de Si_3N_4 é depositada sobre o Co. Isto visa evitar a oxidação superficial da amostra, preservar a qualidade de superfície e reforçar o sinal magneto-óptico. Serão apresentados os resultados das medidas magneto-ópticas feitas no magnetômetro à efeito Kerr existente no Laboratório de Materiais Magnéticos (LMM), bem como a comparação destes com observações da estrutura de domínios nas amostras de 50 μm , obtidas por microscopia à efeito Kerr. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

OTIMIZAÇÃO DO SINAL MAGNETO-ÓPTICO ATRAVÉS DE UM FILME DIELÉTRICO

FUJITA, A.; SANTOS, A. D. DOS
Instituto de Física da USP

No estudo do comportamento magneto-óptico de filmes finos magnéticos em função de campos magnéticos aplicados, dois tipos básicos de utilização dos efeitos Kerr são possíveis: a) observação da estrutura de domínios magnéticos e b) obtenção de curvas de histerese de materiais magnéticos. Em ambos os casos, para materiais apresentando baixas anisotropias ou anisotropias no plano da amostra, os sinais magneto-ópticos são relativamente baixos. Em particular, para a observação de domínios, encontramos fraco contraste entre domínios apresentando diferentes direções de magnetização. Apresentaremos os resultados do efeito de uma camada de material dielétrico (ZnS ou Si_3N_4) sobreposta ao filme magnético, sobre o contraste das imagens de domínios e sobre o nível relativo do sinal magneto-óptico obtido no magnetômetro à efeito Kerr, para filmes à base de Co e/ou Fe , depositados em substrato de vidro. O controle da espessura da camada dielétrica é feito pela técnica de RBS. A dependência do contraste e sinal magneto-óptico em relação à espessura da camada dielétrica será comparada a cálculos feitos a partir dos parâmetros ópticos e magneto-ópticos dos materiais envolvidos. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq.

SIMULAÇÃO DO EFEITO FARADAY E KERR MAGNETO-ÓPTICO EM MULTI-CAMADAS E FILMES FINOS

SANTOS, A. D. DOS
*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo,
S.P., Brasil*
SOUCHE, Y.
*Laboratoire de Magnétisme Louis Néel - CNRS, Grenoble,
França*

Efeitos magneto-ópticos representam uma série de fenômenos onde perturbações no estado de polarização da luz refletida ou transmitida por uma amostra, podem ser correlacionadas à condição de magnetização da mesma. Na reflexão temos os três efeitos Kerr: Polar, Transversal e Longitudinal, enquanto que por transmissão temos o efeito Faraday. O primeiro e o último fornecem um sinal proporcional à componente da magnetização perpendicular ao plano do filme, enquanto o segundo e terceiro permitem discriminar as componentes da magnetização no plano do filme. Em todos esses casos temos dependência linear do sinal magneto-óptico em relação à magnetização. Apresentaremos um programa de computador que permite o cálculo da componente magneto-óptica na luz refletida e transmitida por uma amostra constituída de um empilhamento de

camadas dielétricas, metálicas e magnéticas, até um limite de 20 camadas de espessuras variáveis. Trabalho parcialmente financiado por FAPESP, FINEP e CNPq/RHAE.

MAGNETIC PROPERTIES OF PRASEODYMIUM-SUBSTITUTED IRON GARNET FILMS

AZEVEDO, A.

Dep. de Física - UFPE, Recife.

CINBIS, C.; KRYDER, M. H.

DSSC - Carnegie Mellon University, Pittsburgh USA.

We have investigated the growth conditions, the magnetic properties and low-field Ferromagnetic Resonance (FMR) properties of praseodymium-substituted garnet films. Films of general composition $Y_{3-x-y}Pr_xLu_yFe_5O_{12}$, were grown by liquid phase epitaxy onto [111]-oriented $Gd_3Ga_5O_{12}$ substrates. Vibrating sample magnetometry, torque magnetometry and FMR were used to measure saturation magnetization and the cubic and induced anisotropy constants. It is shown that the uniaxial anisotropy constant K_u and the first order magnetocrystalline anisotropy constant K_1 , have a strong dependence upon the praseodymium content. The addition of praseodymium in the garnet films improves the soft magnetic properties. The effect of the doping by praseodymium on the saturation magnetization is insignificant at room temperature. In-plane coercivity is about $0.1Oe$.

DEPTH PROFILE OF FERROMAGNETIC LAYERED SAMPLES STUDIED WITH PHOTOTHERMALLY MODULATED MAGNETIC RESONANCE

ROMANO, J. A.; MANSANARES, A. M.; SILVA, E. C.
DA; VARGAS, H.

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual
de Campinas, UNICAMP*

The Photothermally modulated ferromagnetic resonance (PM-FMR) technique has been used as a magnetic imaging method and even to investigate bulk properties of ferromagnetic materials. On the other hand photoacoustic (PA-FMR) and photothermal-deflection (PD-FMR) resonance detection were applied earlier for probing of subsurface of solids. In this work we have used PM-FMR for a depth-profile analysis of layered ferromagnetic samples ($\gamma-Fe_2O_3$ and CrO_2 recording tapes) applying either the phase-resolved or the frequency variation methods. The samples were obtained from commercial cassette recording tapes of iron(III) oxide and of chromium dioxide as ferromagnetic layers ($5 \mu m$ thickness on $15 \mu m$ polyester). We got the composed sample by gluing the two individual oxide tapes. The PM-FMR was measured using a Varian E-Line EPR Spectrometer slightly modified, operating at

9.4 GHz with a home-made wall-less cylindrical TE₀₁₁ cavity. This arrangement allows the modulated laser beam to heat the sample inside the cavity without obstruction. Unlikely the conventional FMR configuration no field modulation is used in the PM-FMR experiments. In this case the modulation is the thermal one which we got with the chopped laser beam. We have demonstrated the possibility of depth profile investigations in magnetically inhomogeneous materials using the PM-FMR techniques. In the case of layered samples it was possible isolating the contributions of each layer, as shown for the composed tape sample. The thickness of the microwave absorbing layers was readily estimated with this procedure. For its high sensitivity the PM-FMR technique is advantageous for the mentioned purposes when compared with the other thermal wave resonance detection methods.

ESTUDOS MAGNÉTICOS NA LUDLAMITA SINTÉTICA

MOREIRA, L. F.; MATTIEVICH, E.; DOMINGUES, P. H.

Instituto de Física - UFRJ

Cristais sintéticos de $Fe_3^{2+}(H_2O)_4[PO_4]_2$ (Ludlamita) foram estudados por espectroscopia Mössbauer de 4.2K a 14.7K e por susceptibilidade magnética AC. A Ludlamita apresenta estrutura cristalina formando cadeias lineares de octaedro de Fe^{2+} ligados por arestas. Esta estrutura apresenta dois sítios cristalograficamente distintos para o Fe^{2+} na proporção $II : I = 2 : 1$ formando triades ao longo da cadeia. A estrutura magnética deste material é tal que cada terno de sítio $II-I-II$ acopla-se ferromagneticamente e cada um se acopla antiferromagneticamente com os ternos vizinhos na cadeia e os sítio I apresenta um ângulo de canting de 21° em relação ao sítio II .

A análise do comportamento dos campos hiperfinos, utilizando espectroscopia Mössbauer, para os dois sítios não equivalente, próximos da temperatura de Néel (14.2K) permitiram a determinação do expoente crítico β para cada sítio: com $\beta_1 = 0.279$ e $\beta_2 = 0.249$. Da análise das medidas de susceptibilidade vs temperatura, obtivemos o expoente crítico γ e γ' . Esta análise prediz um momento magnético efetivo de $3.54\mu_B/mol$ compatível com o valor esperado para o Fe^{2+} . No momento estão sendo realizadas as medidas de magnetização deste material.

ESTUDO NA SÉRIE SINTÉTICA FOSFOFERRITA-KRYZHANOVSKITA

MOREIRA, L. F.; MATTIEVICH, E.; DOMINGUES, P. H.

Instituto de Física - UFRJ

O processo de oxidação na série de cristais sintéticos de Fosfoferrita-kryzhanovskita ($Fe_3^{2+}(PO_4)_2(H_2O)_3 \rightarrow$

$Fe_3^{3+}(PO_4)_2(OH)_3$) foi acompanhado por espectroscopia Mössbauer e susceptibilidade magnética. Os extremos da série foram estudados, em material natural, onde foi mostrado tratar-se de uma série isoestrutural. A série oxidada foi obtida de cristais sintéticos de fosfoferrita submetidos à temperatura de $98^\circ C$ por tempos diferentes. Observou-se que, nesta temperatura, após 40 horas de exposição, o composto tende a estabilizar o processo de oxidação por volta de 80% oxidado. Para obter os demais compostos foi necessário um temperatura mais elevada. A validade dos ajustes Mössbauer foram julgados com base no valor $\text{do } \chi^2$ e na convergência do processo de ajuste. Para os compostos nos extremos da série, apenas dois dubletes foram necessários para ajustar os espectros e em ambos os casos ($2Fe^{2+}$ para a fosfoferrita e $2Fe^{3+}$ para kryzhanovskita) obtivemos a razão $Fe(I)/Fe(II) \approx 1/2$ em concordância com a estrutura cristalina. No início da série apenas quatro dubletes foram necessários. Os dois dubletes férricos podem ser interpretados com dois sítios de Fe^{3+} cuja vizinhança Fe^{2+} . A medida que o processo de oxidação evolui, aparecem mais dois dubletes férricos correspondendo aos dois sítios $Fe(I)$ e $Fe(II)$, agora com avizinhança de Fe^{3+} . Pelos resultados de ajuste Mössbauer e analisando a estrutura cristalina podemos observar que as águas que primeiro se oxidam são aquelas que ligam duas cadeias na direção b , provocando preferencialmente a oxidação dos sítios de $Fe(II)$. As medidas de susceptibilidade apresentaram um curva de ferromagnetismo fraco como na Ludlamita. Uma queda drástica no sinal da intensidade da susceptibilidade nos leva a crer que este sinal esteja relacionado com as triades compostas unicamente de Fe^{2+} . Estas triades estariam acopladas interna, ferromagneticamente com canting, e estas por sua vez, se acoplariam antiferromagneticamente entre si, resultando num ferromagnetismo fraco. O material totalmente oxidado não apresenta ordem de longa distância, embora, vista pelo Mössbauer, a ordem de curta distância começa a aparecer para temperatura em torno de 40K.

MÖSSBAUER AND MAGNETIZATION STUDIES OF Fe/Eu AND V/Eu MULTILAYERS

PASSAMANI, E. C.

CBPF

MIBU, K.

Kyoto University, Japan

SAITOVITCH, E. B.; ELMASSALAMI, M.; BUD'KO, S.

L.

CBPF

SHINJO, T.

Kyoto University, Japan

Magnetic properties of $[Fe(40\text{\AA})/Eu(x\text{\AA})]$ and $[V(40\text{\AA})/Eu(x\text{\AA})]$ ($10 < x < 200$) multilayers were studied with Mössbauer and magnetization measurements. The ^{57}Fe Mössbauer spectra of the Fe/Eu multilayers at 300K and 4.2K are close to those of bulk $\alpha - Fe$, except for a minor interface component with a reduced hyperfine field. The ^{151}Eu Mössbauer spectra of Fe/Eu multilayers at 4.2K can be fitted with two components as well: a component with bulk Eu hyperfine parameters and a component with a reduced hyperfine field. The reduction of hyperfine fields at the Eu sites is also observed for the V/Eu multilayers, where the Eu layer is sandwiched between nonmagnetic layers. The X-ray, ^{151}Eu Mössbauer and ac susceptibility measurements show that the Eu layers suffer gradual oxidation to ferromagnetic EuO . Additional measurements are in progress to understand the magnetic properties of these magnetic/ Eu and nonmagnetic/ Eu multilayer system.

Dinâmica de Rede em ligas de Na_xK_{1-x} .

NERO, J. D.; DJANIKIAN, F.; LAKS, B.

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Investigamos neste trabalho a dinâmica de rede de uma liga metálica com estrutura cristalina bcc. O potencial adiabático total é constituído por um modelo baseado nas interações eletrostáticas entre os íons e os elétrons de condução, na interação repulsiva entre os íons, descrita por um modelo de Born Mayer, um pseudo potencial de interação local entre os elétrons de caroço e os elétrons de condução.

As energias de correlação e troca são incluídas no modelo. Os parâmetros que entram no cálculo para o Na e o K são determinados a partir do ajuste da energia de ligação do cristal e suas primeiras derivadas a zero grau em relação ao volume. Apresentamos as curvas de dispersão dos fonons ao longo das direções $(\zeta, 0, 0)$, $(\zeta, \zeta, 0)$ e (ζ, ζ, ζ) como função da concentração dos componentes.

Estrutura Eletrônica em Sistemas Desordenados de Alta Dimensionalidade

LAKS, B.; DJANIKIAN, F.; NERO, J. D.

Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

A estrutura eletrônica em sistemas ordenados tem sido

área de investigação, quer seja teórica, quer seja experimental, já por várias décadas. No entanto o estudo de sistemas desordenados ou mesmo de sistemas amorfos somente agora, com a disponibilidade de computadores rápidos, tem sido atacado com relativo sucesso. Neste trabalho apresentamos a estrutura eletrônica de uma liga binária descrita por um hamiltoniano de ligação forte formado a partir de orbitas atômicas do tipo s associada com o conjunto de sítios da rede cristalina. Desordem diagonal é incorporada ao modelo. A densidade de estados eletrônicos é obtida através de um método de cluster central baseado na expansão da função de Green. A utilização do tratamento local permite a média sobre os sítios em um cluster central mantidos exatos o mesmo número de momentos. O meio efetivo é tratado via aproximação de cristal virtual. Os resultados são comparados com cálculos de simulação numérica (Monte Carlo).

Estudo de Propriedades Termodinâmicas em Metais Alcalinos via Dinâmica Molecular

DJANIKIAN, F.; NERO, J. D.; LAKS, B.

Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

Apresentamos neste trabalho um estudo das propriedades termodinâmicas em ligas de sódio e potássio utilizando a técnica de dinâmica molecular em que o movimento clássico de um sistema de íons é resolvido com auxílio de computadores. A célula computacional empregada em nossos cálculos é um paralelepípedo correspondente a 8 parâmetros de rede, contendo 1024 íons em rede bcc. Condições de contorno são impostas de forma a reproduzir um sistema infinito, eliminando efeitos de superfície. Em nosso cálculo supomos que os metais que constituem o sistema são formados por íons e elétrons de condução. Os íons são formados por núcleos e elétrons de caroço. Supomos ainda que há ausência de sobreposição entre os caroços adjacentes e que os elétrons de condução tem comportamento próximo ao de um gás de elétrons livres. O potencial de interação entre os pares de partículas consiste da interação eletrostática e a repulsão Born-Mayer entre os íons; e a interação elétron-íon tratada na teoria de pseudopotencial local. Efeitos de anarmonicidade são mostrados explicitamente.

ÓTICA

Guias de Onda e Fibras Ópticas (OTI) - 08/06/94

COLLOCATION METHOD FOR ANALYSIS AND MODELING OF GUIDED WAVE OPTICAL COMPONENTS AND DEVICES

SHARMA, A.

Physics Department, Indian Institute of Technology Delhi NEW DELHI - 110 016, India

Guided wave optical devices, based on optical fibers and integrated optical waveguides, have recently assumed great importance due to their applications in optical communication and information processing. In both optical fibers and integrated optical devices, the basic phenomenon is that of waveguidance, and in order to effectively analyse and design these guided wave components and devices, it is necessary to understand the phenomenon of wave propagation through them. In the most basic form, this requires the solutions of Maxwell's equations for the boundary conditions represented by the waveguiding structure. Fortunately, for optical waveguides, in most cases of practical importance, the conditions are such that the vector nature of optical waves can be ignored, at least to a very good approximation, and then, it suffices to solve the much simpler Helmholtz equation. This "simpler" Helmholtz equation, however, is still difficult to solve particularly if the waveguides are not uniform along the direction of propagation which is the case for most of the devices. One then has to use approximate and/or numerical techniques to obtain solutions of the Helmholtz equation. Recently, we have developed a new and efficient numerical method for propagating total fields or beams through guided wave structures. The method, based on the orthogonal collocation method, converts the Helmholtz equation into a matrix total differential equation which can be solved analytically or numerically. In the present paper, we will discuss this method and its application to several cases of practical importance, for example, wave propagation through waveguide tapers and Y-junctions, reflections from a periodic waveguide, intensity fluctuations due to random variations in waveguide properties, etc. Each of these examples uses a different method for solving the matrix equation and this is one of the strengths of the method. In other methods, such the beam propagation method, one has to use numerical solution only, but in our method, depending on the guiding structure, one may have analytical or approximate solution of the propagation problem. These aspects will also be illustrated.

ANALYSIS OF FOUR-LAYER CYLINDRICAL DIELECTRIC WAVEGUIDES: COAXIAL FIBERS

MELO, C. A. DE S.; NUNES, F. D.; SILVA, H. F. DA
UFC

Directional couplers are basic devices for a large number of applications in optical communication and other fields as for example sensing. These devices are formed when occurs overlap of the fields of two adjacent waveguides. Such a device can be fabricated for a cylindrical symmetrical system as that of coupled rod and tube optical fibers. This structure is found in coaxial fibers, a four layer fiber, and was initially studied by Boucouvalas [1] for a specific structure. Recently a narrowband all-fiber spectral filters were successfully fabricated in CPqD-Telebras using coaxial fiber with a different structure of that used in reference [2]. In this work we analyse coaxial fibers for different structures under LP approximation. The LP mode transcendental equation obtained by us is not in agreement with that reported in ref [2]. Many characteristics for the different structures such as dispersion relation, mode cut-off

conditions, modal dispersion and field distribution are analysed. Main attention is given to HE modes (LP_{01} and LP_{02}) because of their importance for describing spectral filters.

[1] Electron Lett., 18, pp. 138-140 and pp. 679-681 (1982).

[2] J. Lightwave Tech., LT-3, n.5, 1151-1158 (1985).

INFLUÊNCIA DAS DIMENSÕES DA FIBRA NA POTÊNCIA DE SATURAÇÃO DE SAÍDA DE AMPLIFICADORES A FIBRA DOPADA COM ÉRPIO

PONTES, M. J.; SOUZA, R. F.

FEE - UNICAMP

FRAGNITO, H. L.

IF - UNICAMP

Desenvolvemos um modelamento numérico para o projeto de um Amplificador a Fibra Dopada com Érbio (AFDE), objetivando a sua aplicação como Amplificador de Potência. Nossos resultados mostram que existe uma região de bombeio ótima que maximiza a potência

de saturação de sinal de saída. Concluiu-se também que o raio de dopagem deve ser igual ao raio do núcleo, neste caso, e que há um limite superior para a escolha de abertura numérica a partir da qual ocorre a diminuição da potência de saturação de saída. O programa permite projetar a geometria da fibra que maximiza a potência de saturação sobre uma dada potência de bombeio.

Self-Phase Modulation and Cross-Phase Modulation

LESCHÉ, B.

Instituto de Física UFRJ

MARGULIS, W.

Departamento de Física PUC-Rio de Janeiro

It is a well known fact that cross phase modulation (XPM) is a two times more efficient process than self phase modulation (SPM), and therefore SPM and XPM are physically well distinct. However, this factor 2 is not always observed experimentally. In many experiments one finds a phase modulation similar to the XPM although a single laser beam is used. In this work it is investigated to what extent self phase modulation and cross phase modulation operate when a single non Fourier transform limited pulse travels in a non linear medium. We restrict our investigation of intensity induced phase effects to those that can be measured with stationary interference patterns. For these stationary phase effects it is found that the percentage of self phase modulation and cross phase modulation depend on the statistical properties of the laser pulse.

REFLECTOMETRIA ÓTICA COERENTE DE ALTA RESOLUÇÃO PARA CARACTERIZAÇÃO DE DISPOSITIVOS DE ÓTICA INTEGRADA.

SAAVEDRA, A. A.; WEID, J. P. V. D.

CETUC - PUC-RJ

PASSY, R.; GISIN, N.

Université de Genève - Groupe de Physique Appliquée.

Entre as diferentes técnicas de caracterização de componentes e circuitos óticos a reflectometria tem uma posição de destaque devido ao seu conteúdo de informações. A reflectometria consiste em analisar o sinal ótico que é refletido ao longo de uma linha ou guia de onda, e contém informações sobre defeitos ao longo da linha, além das perdas distribuídas. O maior problema na análise de dispositivos é a grande resolução necessária, requerendo pulsos de fentos segundos para analisar dispositivos pela técnica convencional de reflectometria no domínio do tempo. A opção de se empregar a interferometria de baixa coerência apresenta o inconveniente de requerer uma fonte de espectro largo, que nem sempre corresponde ao domínio espectral de operação dos dispositivos a serem testados. Assim sendo, a in-

terferometria heteródina coerente (OFDR) apresenta-se como uma técnica de alto poder de resolução, combinada a uma faixa espectral bastante estreita para poder ser empregada nos dispositivos mais sintonizados que se tem conhecimento. O princípio da medida baseia-se na varredura em frequência de um laser DFB, e na detecção do sinal FI proveniente da interferência entre o sinal lançado no dispositivo e o refletido ao longo do mesmo. Um interferômetro de Michelson permite o batimento destes dois sinais óticos, de modo que a escala de tempo é dada pela rampa de varredura em frequência do laser DFB. Em se tratando de uma técnica interferométrica, ela apresenta uma sensibilidade muito alta, por contar com um laser local para a detecção do sinal de FI. Os principais fatores limitantes desta técnica são o ruído FM e de "mode hopping" do laser DFB, a largura de linha e coerência, além da LINEARIDADE NA RAMPA DE FREQUÊNCIA. Foi desenvolvida uma técnica de interferometria heteródina para caracterização de dispositivos de ótica integrada. Com este sistema foi alcançada uma resolução de 400um numa faixa de trabalho de 10cm em dispositivos óticos de vidro.

Este trabalho foi realizado com o apoio do CPqD TELEBRÁS, contrato no.513/93.

PHOTOLUMINESCENCE EXCITATION SPECTROSCOPY AS A PROBE OF THE QUANTUM DOT SIZE DISTRIBUTION IN CdTe-DOPED-GLASSES

OLIVEIRA, C. R. M. DE; PAULA, A. M. DE; PLENTZ FILHO, F. O.; MEDEIROS NETO, J. A.; BARBOSA, L. C.; ALVES, O. L.; MENEZES, E. A.; RIOS, J. M. M.; FRAGNITO, H. L.; CRUZ, C. H. B.; CESAR, C. L.

IFGW - UNICAMP

We used photoluminescence excitation (PLE) spectroscopy at 2K to resolve the spectrum of CdTe quantum dots of different sizes inside their much broader size distribution in CdTe doped glasses. The spectra obtained show several well resolved lines, which were only suggested by the usual absorption spectra. We were able to study the confinement as a function of the quantum dot size, with only one sample, just by changing the energy used to collect the photoluminescence. The spectra of different samples collected at the same energy are similar except for the linewidth which are broader for the samples with larger average quantum dot size, whereas spectra collected at different energies for the same sample are blue shifted as collection energy increases. The simple model of a particle in a spherical box can explain most of the observed transition lines except for the second one which we assigned to the $1S_e-1P_{hh}$ forbidden transition. This indicates that a more realistic model shall consider hole bands mixing.

Imagens e Holografia (OTI) – 08/06/94

ESPALHAMENTO ANGULAR E FUNÇÃO DE AUTOCORRELAÇÃO EM CORRUGAÇÕES QUASE-PERIÓDICAS

FERREIRA, N. G.
ICET - UNIVAP - S. J. Campos - SP
MELLO, B. DE A.; CESCATO, L.
IFGW - UNICAMP - Campinas - SP

O espalhamento da luz por uma superfície depende das rugosidades desta, descritas pela função autocorrelação $G(\tau) = \langle z(x) \times z(x+\tau) \rangle$. A teoria vetorial de espalhamento fornece uma equação que expressa a intensidade de luz espalhada por unidade de ângulo sólido, e que é função do ângulo de incidência, do ângulo de espalhamento, da polarização e da função densidade espectral $g(k) = T.F.[G(\tau)]$. Esta função é obtida usando o método de pequena perturbação, sendo válida quando $\delta_{rms} \ll \lambda$, onde $\delta_{rms} = \sqrt{G(0)}$ é o valor rms do relevo $z(r)$ da superfície. As medidas de TIS (*Total Integrated Scattering*), são muito usadas para caracterizar as rugosidades da superfície, mas a medida do espalhamento angularmente resolvido (ARS - *Angle Resolved Scattering*) permite-nos obter informação sobre a distribuição de frequências espaciais da superfície, através da fórmula descrita acima. Usando um laser de He-Ne incidindo sobre uma amostra fixa, e um detector montado sobre um motor de passo, que gira ao redor da amostra, podemos obter medir o ARS. Amostras de n-InP, polidas em diferentes faces e atacadas fotoeletroquimicamente em diferentes intensidades são medidas usando este método, e a função autocorrelação obtida é comparada com a medida diretamente do perfil, em fotografias SEM. Devido à periodicidade e à anisotropia da rede cristalina, as estruturas apresentam certa periodicidade, e comportamento diferente em diferentes direções. Mostramos a viabilidade do método para análise da superfície, e as condições em que podemos aplicá-lo.

Lasers (OTI) – 08/06/94

Medidas Diretas de Frequência de Linhas Laser

TELLES, E. M.; SCALABRIN, A.; PEREIRA, D.
UNICAMP

Neste trabalho relatamos a introdução no Brasil da técnica de medidas diretas de frequência de linhas laser na região do Infravermelho Longínquo (IVL $\cong 1$ à

10 THz). A técnica consiste em misturar, através de um elemento não linear, radiações de lasers moleculares operando no IVL, de frequências próximas, e medir a frequência do sinal de batimento gerado. Assim, conhecendo-se uma das frequências misturadas obtém-se o valor da frequência incógnita. Para a aplicação desta técnica, construímos o elemento não linear e dois sistemas independentes de lasers constituídos cada um por um laser de CO_2 (fonte de bombeamento óptico) e um laser molecular no IVL. O elemento não linear é um diodo de contato de ponta do tipo Metal-Isolante-Metal (MIM). Ele é responsável pela detecção, mistura e geração do sinal heterodino. As linhas IVL foram geradas por moléculas do tipo metanol - CH_3OH - excitadas opticamente. Dessa forma, reprodutibilidade em frequência da ordem de 2 partes em 10^7 é atingida. Medidas preliminares na região de 600 GHz à 2.5 THz foram obtidas. Assim, a eficiência do sistema construído, arranjo experimental e técnica empregada fica demonstrada além de nos capacitar a realizar este tipo de medida para linhas de interesse metrológico. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq, FAEP-UNICAMP.

Imagens e Holografia (OTI) – 08/06/94

MULTIPLE GRATINGS IN SEMI-INSULATING GaAs CRYSTAL

BIAN, S.
Harbin Institute of Technology, Harbin, China
FREJLICH, J.
UNICAMP
SUGG, B.; RUPP, R. A.
Universität Osnabrück, Osnabrück, Germany

Analyzing anisotropic diffraction properties of photorefractive gratings in GaAs crystals and the symmetry difference of energy exchange between index-of-refraction and amplitude gratings, we identify three holographic gratings, namely a photorefractive, a non-photorefractive index-of-refraction and a photochromic grating occurring simultaneously in semi-insulating GaAs crystals. The latter two exhibit diffraction efficiencies that are roughly more than one and two orders of magnitude, respectively, lower than that from the hologram of photorefractive origin. Experiments are carried out using a continuous phase modulation technique in a two-wave mixing setup at a wavelength of $1.06 \mu m$. All experimental results in this paper including beam coupling, polarization effects, spatial frequency and irradiance dependence, and response time measurement are consistent with the theoretical model referred to for these three simultaneous effects in GaAs. It was show

that all three effects are probably originating from the electric polarizability changes arising from photoelectron trap spatial modulation occurring during photorefractive recording.

Lasers (OTI) - 08/06/94

INSTABILIDADES NO ACOPLAMENTO DE LASERS DE CO₂ COM ABSORVEDOR SATURÁVEL

OLIVEIRA, P. C. DE

Univ. Federal da Paraíba

LIU, Y.; DANAILOV, M. B.; LEITE, J. R. R.

Univ. Federal de Pernambuco

Dois lasers de CO₂ com absorvedor saturável intracavidade foram acoplados óticamente por injeção de intensidade de luz. Independentes de efeitos de interferência, foram observadas instabilidades dinâmicas periódicas e caóticas, de acordo com um modelo de equações de taxa que considera três níveis para o meio de ganho e dois níveis para o meio absorvedor. Com o acoplamento dos lasers predominantemente nos absorvedores obtivemos sincronização dos pulsos emitidos pelos dois lasers. Enquanto que, acoplando predominantemente nos amplificadores os lasers anti-sincronizaram seus pulsos, ou seja, seus pulsos se alternavam no tempo. Os sincronismos dos pulsos foram observados tanto em regime periódico, quanto, de forma parcial, em regime caótico.

Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/94

GRAVAÇÃO HOLOGRÁFICA AUTO-ESTABILIZADA EM CRISTAIS DE LiNbO₃

GARCIA, P. M.; FRESCHI, A. A.; FREJLICH, J.

UNICAMP

Neste trabalho descrevemos o processo de gravação auto-estabilizada de redes de difração holográficas em cristais de LiNbO₃:Fe. As redes gravadas são de natureza fotorrefrativa, ou seja, se originam da modulação do índice de refração no volume do cristal via efeito eletroóptico. Mostramos que este método permite gravar redes com 100% de eficiência de difração mesmo utilizando feixes de escrita de baixa intensidade (entre 5 e 10 mW/cm²) de um laser de Ar⁺ ($\lambda = 514.5\text{nm}$). Dependendo da dopagem do cristal utilizado como meio, o tempo de gravação pode chegar a ser cerca de meia

hora, e devido à lentidão do processo, sem a estabilização holográfica não seria possível atingir aquela eficiência de difração da rede. Por este método podemos ainda posicionar o padrão de franjas de interferência em contra-fase relativa à sua posição prévia, e deste modo produzir o apagamento estabilizado da rede de difração. A evolução temporal do processo é muito bem descrita por uma formulação matemática simples. Realizamos experimentos com duas amostras de LiNbO₃:Fe com diferentes concentrações de dopante. A partir desse experimento mostramos a eficácia desse método, que abre novas perspectivas de estudos e aplicações desses cristais.

Lasers (OTI) - 08/06/94

2.3ps Pulses from a Kerr-Lens Modelocked Lamp-Pumped Nd:YLF Laser

GOUVEIA-NETO, A. S.

Departamento de Física - Universidade Federal de Alagoas

RAMASWAMY, M.; IZATT, J. A.; FUJIMOTO, J. G.

Research Laboratory of Electronics - MIT

NEGUS, D. K.

Coherent Laser Group - Coherent Corp.

Pulses as short as 2.3 ps have been generated by passive mode locking of a lamp pumped Nd:YLF laser with a microdot mirror mode locker for Kerr lens modelocking (KLM) saturable absorber action and a compact Gires-Tournois interferometer for dispersion compensation. Kerr Lens Modelocking was initiated with an acousto optic modulator and could be turned off after the modelocking process had started. Average output powers of 800 mW corresponding to peak pulse powers of 2.0 kW at 100 MHz repetition rate, have been achieved. This result demonstrates the potential use of Kerr lens mode locking for generating near bandwidth limited pulses from high power lamp pumped sources.

Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/94

HOLOGRAMAS EM LiNbO₃:Fe COM MODULAÇÃO MAIOR QUE A NECESSÁRIA PARA 100% DE EFICIÊNCIA DE DIFRAÇÃO

FRESCHI, A. A.; GARCIA, P. M.; FREJLICH, J.

UNICAMP

O registro holográfico em cristais $\text{LiNbO}_3:\text{Fe}$ está associado à redistribuição espacial de cargas no interior do cristal. Essa redistribuição modula espacialmente o índice de refração do cristal, registrando informações luminosas na forma de redes holográficas denominadas fotorrefrativas (que correspondem à modulação da parte real do índice) e fotocromicas (associadas à modulação da parte imaginária do índice). Tais redes possuem diferentes propriedades na distribuição de energia em experimentos de mistura de duas ondas, o que permite a detecção seletiva de um pequeno efeito fotocromico mesmo na presença de uma rede fotorrefrativa com grande amplitude de modulação. Neste trabalho utilizamos essa pequena rede fotocromica como referência para operação de um sistema ativo de estabilização holográfica que corrige as perturbações ambientais na montagem durante o registro, mantendo fixa a relação de fase entre o holograma que está sendo gravado e o padrão luminoso que o gera. Nessas condições registramos uma rede fotorrefrativa com amplitude de modulação muito superior ao valor requerido para 100% de eficiência de difração. A gravação de hologramas com amplitude de modulação acima de 100% de eficiência não é possível se utilizamos a própria rede fotorrefrativa como referência para a estabilização.

Lasers (OTI) - 08/06/94

A Semiconductor Doped Glass Based Passive Q-Switch For Near Infrared, Tunable Lasers

MUNIN, E.; VILLAVERDE, A. G. J. B.

IFGW- Universidade Estadual de Campinas

BASS, M.

CREOL- University of Central Florida

Passive Q-switching using semiconductor doped glass (SDG) filters is demonstrated for the recently developed class of broad band, tunable, solid state lasers operating in the near infrared. Two SDG filters manufactured by Schott (RG-830 and RG-850) were selected for this work. Saturation of the absorption in such filters in the 800 - 900 nm region is reported along with data on efficient Q-switching of a flash lamp pumped Cr:LiSAF laser producing single pulses as short as 19 ns and energies as high as 95 mJ per pulse. To evaluate the operating range of the SDG filters as passive switches two prisms were inserted in the laser cavity. Each 3 mm thick filter showed a tuning range in excess of 20 nm. Data on laser induced darkening of the filters is also presented. The effect of the photo induced darkening in RG-850 on the laser output energy was tested during prolonged Q-switch operation of the Cr:LiSAF laser.

Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/94

A 1m HOLOGRAPHIC SCREEN FOR PROJECTING IMAGES OF OBJECTS, PHOTOGRAPHS AND HOLOGRAMS.

LUNAZZI, J. J.

Campinas State University - UNICAMP

BOONE, P. M.

University of Ghent, Belgium.

Holographic screens were previously reported by one of the authors as a means of keeping the continuous parallax when projecting images of objects and holographs [1] [2]. They look in perfect 3D resembling a Benton hologram but changing color along the horizontal viewing direction. We report here the making of holographic screens of dimensions up to 1.14m x 0.75m that keeps all of the previously reported abilities. They were made by means of a pulsed laser (ruby) on AGFA 8E75 holographic film. We first projected images of an object viewed through the first order of a common diffraction grating, same as in [2], which could be seen in the whole extension of the screen (0,75m wide) at any desired depth in front or in the back of the screen (orthoscopic and pseudoscopic images, virtual and real, respectively). The only limit for depth representation was the need of having a portion of the screen as a background for any image point being imaged. Common photographs could also be projected by means of a standard slide projector. They can be located at any plane in the image space by using a diffraction grating for coding the projection. Holophotographs [2] were also projected showing a good 3D effect. Common holograms were projected by reconstructing them with a lateral white light beam. An enlarged version (x 20) of the original holograms was obtained.

References:

- 1) "New possibilities in the utilization of holographic screens", J.J. Lunazzi, Proc.of the SPIE meeting "Electronic Imaging", conference "Practical Holography VI", San Jose-CA-USA, 9-14.02.92.
- 2) "White-light color-encoded photography for rendering holo-images in a diffractive screen", J.J.Lunazzi, to be published in Proc. of the Fourth Intl.Conf. on Holographic Systems, Components and Applications, University of Neuchatel, Switzerland, 13-15.09.93.

Lasers (OTI) - 08/06/94

**FABRICAÇÃO DE LASERS DE POTÊNCIA
EMITINDO EM $1,48\mu$ PARA BOMBEIO DE
AMPLIFICADORES À FIBRA DOPADA
COM Er^{3+} .**

MARTINS, R. B.; OLIVEIRA, W. J. C. DE;
RODRIGUES, J. R. F. M.; GIANANTE, M.; PATEL,
N. B.

CPQD-TELEBRAS

O recente sucesso dos amplificadores ópticos à fibra dopada com Er^{3+} (AFDE) nos sistemas de comunicações ópticas, está diretamente associado à fabricação de lasers semicondutores de potência, os quais possibilitaram ao AFDE ser um dispositivo compacto e com baixo consumo de energia. Poucos laboratórios no mundo detêm a tecnologia completa de fabricação de um AFDE: desde a fibra dopada ao laser de bombeio. Esta foi a principal motivação do presente trabalho: produzir no Brasil lasers de bombeio para AFDEs, a fim de obter conhecimento tecnológico deste componente bastante estratégico. Partindo de estruturas do tipo DC-PBH (double channel buried planar heterostructure), originalmente desenvolvidas para fabricação de lasers de sinal para operação em $1,55\mu m$, o presente trabalho resume as modificações que foram feitas tanto na estrutura quanto na montagem dos lasers e que culminaram com dispositivos DCPBH emitindo em $1,48\mu m$ com potências óticas de até $35mW$ acoplados em fibra monomodo. Estes valores podem ser considerados excelentes se levarmos em conta que foram obtidos com lasers "bulk" (camada ativa espessa) e crescidos por epitaxia de fase líquida. Estes lasers vêm sendo utilizados com sucesso nos módulos de AFDE desenvolvidos no CPQD-TELEBRAS.

Agradecimentos a Colegas, J. C. Calegon, L. C. S. Vieira, C. Marsola, E. Missio, E. J. Barbosa, C. Coral pelo apoio técnico.

Imagens e Holografia (OTI) - 08/06/94

**HOLOCAD Z-ÁXIS CONTROL BASED
ONLY ON GALVANOMETERS**

LUNAZZI, J. J.; DIAMAND, M.
UNICAMP

Images produced by the holoCAD system [1,2] are formed by voxels (volume elements) whose Z-coordinates

are encoded by means of diffraction. In previous versions of the system this depth selection was given by the deflection of a white-light beam that by traversing different regions of a diffractive lens acquired different chromatic dispersions. This paper shows a way of substituting the diffractive lens by a common diffraction grating, that besides being easier to obtain, also simplifies the calculation that describes the image generation of holoCAD. We first propound a depth-selector based on the longitudinal displacement of a diffraction grating, then we describe a method for suppressing this movement, making it possible to select Z-coordinates just by tilting a mirror by means of a galvanometer. This new possibility allows holoCAD for generating 3D images with horizontal parallax at speed rates compatible with conventional 2D vector displays. The Z-galvanometer represents the only additional moving part. Although this system follows a vector-display architecture and generates wire-frame figures, it can still be improved to display surfaces and solids and to work as a 3D-TV. We describe how this enhancements can be achieved through the use of faster beam scanners and spatial light modulators.

REFERENCES: 1. J.J. Lunazzi, M. Diamand, J.M. Jaramillo, "HOLOCAD, A NEW POSSIBILITY", proceedings of the V Simpósio Estadual de Lasers e Aplicações, São Paulo - SP/BR, Oct. 1992, pp 118-119.

2. J.J. Lunazzi, M. Diamand, J.M. Jaramillo, "HOLOCAD - DIFFRACTIVE IMAGING ANALYSIS AND DEVELOPMENT OF A DEPTH SELECTOR", proceedings of the XVI Encontro Nacional da Física da Matéria Condensada, Caxambu - MG/BR, May 1993, pp 98-101.

Lasers (OTI) - 08/06/94

**REFLECTOMETRIA ÓTICA COERENTE
DE LONGA DISTÂNCIA COM LASER DFB
ACOPLADO A UMA CAVIDADE
EXTERNA.**

VON-DER-WEID, J. P.; SAAVEDRA, A. A.
CETUC - PUC-RJ

PASSY, R.; GISIN, N.

Université de Genève - Groupe de Physique Appliquée.

A reflectometria ótica coerente baseia-se na interferência da luz refletida pela amostra a ser testada com uma reflexão de referência. Nesta técnica utiliza-se uma fonte coerente de luz cuja frequência ótica é variada de

forma linear ao longo do tempo. A luz é lançada no sistema em teste através de um acoplador ótico, e um detetor mede o sinal proveniente da interferência entre a reflexão gerada nos dois braços do acoplador. Um dos braços gera apenas uma reflexão na sua extremidade, enquanto que no outro braço insere-se o sistema a ser testado. Desse modo, reflexões provenientes de diferentes pontos do braço de teste geram frequências óticas distintas, que são detectadas de forma heteródina através do batimento com a reflexão de referência. O alcance máximo obtido com esta técnica está limitado pelo comprimento de coerência da fonte utilizada. Os lasers DFB são fontes de luz cuja frequência pode ser facilmente controlada pela corrente de alimentação. Para se aumentar o comprimento de coerência do laser formamos uma dupla cavidade externa com a reflexão proveniente de dois conectores FC/PC inseridos no pigtail do laser DFB. A largura de linha resultante foi reduzida de 50 MHz, no laser solitário, para 6 KHz no laser acoplado à dupla cavidade. A varredura de frequência foi obtida variando-se o comprimento da cavidade externa com um transdutor piezoelétrico. Com isto obtivemos grande linearidade na varredura de frequência mantendo a largura de linha abaixo dos 10 KHz. A resolução obtida com o sistema foi da ordem de 3% e o alcance atingiu cerca de 1.000 m. O nível de ruído permitiu a medida da reflexão e perdas numa solda entre duas fibras além da medida do nível de retroreflexão Rayleigh. Trabalho realizado com o apoio da PTT Suíça e do CPqD TELEBRÁS, sob o contrato 513/93

Ótica não Linear e Espectroscopia (OTI) - 08/06/94

ESTUDOS DE TUNABILIDADE EM MODULADORES ELETRO-ÓTICOS

MUNIZ, S. R.; MARCASSA, L. G.; ZÍLIO, S. C.; BAGNATO, V. S.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Nestes últimos anos os moduladores eletro-óticos (EOM) tem desempenhado um papel muito importante na área de física atômica, permitindo a geração de novas frequências a partir de um único feixe de laser. Um grande problema relativo ao EOM de cavidade ressonante é a questão da tunabilidade de frequência. Ao construirmos um modulador, a cavidade é desenhada de forma a ressonar numa frequência fixa. Quando estamos operando nesta frequência o processo é bastante eficiente, conseguindo-se cerca de 80% a 90% de eficiência. Porém devido ao alto fator de qualidade, Q , este rendimento cae drasticamente com uma pequena variação na frequência. Isto constitui um grande in-

coveniente, pois na maioria das vezes temos (ou gostaríamos de poder) ajustar a frequência do modulador à frequência requerida num determinado experimento em física atômica e molecular. Com esse objetivo estudamos algumas formas de construir cavidades sintonizáveis. Para isso usamos técnicas semelhantes as usadas na recepção de rádio. Através da inserção de diversos tipos de materiais no interior da cavidade observamos a variação da frequência de ressonância (Ω) e a eficiência de modulação. Além disso, estudamos também como varia Ω em função da temperatura. Os resultados obtidos com a variação de temperatura não foram animadores, bem como os obtidos com a inserção de um bastão de ferro ou vidro. No caso do cobre os resultados já foram melhores e apesar de preliminares, mostram novas perspectivas. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq

Intense 525 nm Light Generated Through ASE in Er³⁺-Doped Germanosilicate Optical Fiber Pumped at 1.319 μ m.

SILVA, D. L. N.; GOUVEIA, E. J. T. DE A.; REIS, A. M.; BORGES, N. M.; GOUVEIA-NETO, A. DA S.
UFAL

We present the generation of intense 525 nm green light in monomode Er³⁺-doped germanosilicate fiber, pumped by a Nd:YAG laser operated at 1.319 μ m, through amplified spontaneous emission (ASE). That emission corresponds to the $^2H_{11/2} \rightarrow ^2I_{15/2}$ transition and the pumping mechanism is accomplished by a first step resonant two-photon absorption exciting $^4F_{9/2}$ level, and a second one-photon step excited-state absorption ($^4I_{9/2}$) which with the $^2H_{11/2}$ state is populated. In addition to the ASE mechanism, efficient third-harmonic generation at 439 nm has also been observed in short lengths of fiber. The stepwise three-photon frequency up-conversion process is enhanced via resonant two- and three-photon transitions connecting ions $^4I_{15/2}$ ground-state to the $^4F_{9/2}$ and $^4F_{5/2}$ excited-states levels, respectively, giving rise to amplified spontaneous emission from the $^2H_{11/2}$ level to the $^4I_{15/2}$ ground-state.

Saturação da Geração de Segundo Harmônico em Fibras Óticas

LACERDA, M. M.; CARVALHO, I. C. S.; MARGULIS, W.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
LESCHÉ, B.

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Neste trabalho estuda-se o efeito de saturação na geração de segundo harmônico (SHG) em fibras óticas. Três são os possíveis mecanismos envolvidos no processo de saturação. O primeiro diz respeito a limitação do número de centros ou sítios disponíveis no mate-

rial. O segundo é devido ao apagamento por luz da rede de $\chi^{(2)}$, formada durante o processo de dobra de frequência, envolvendo a geração de quarto harmônico ou mistura de dois fótons de 2ω . Finalmente, o terceiro mecanismo trata da defasagem entre as ondas envolvidas na SHG ($\omega e 2\omega$). Experiências com fibras auto-preparadas no regime de saturação foram realizadas utilizando-se a técnica de varredura de calor. Desta maneira obteve-se a forma da rede de $\chi^{(2)}$. Um modelo numérico foi desenvolvido levando-se em conta os mecanismos acima descritos. Comparações com as experiências mostraram que o apagamento por luz é o responsável pela saturação da SHG.

Efeitos de Saturação na Instabilidade Modulacional de Fibras Ópticas com não-linearidade de alta ordem

LYRA, M. L.; GOUVEIA-NETO, A. DA S.

Departamento de Física - Universidade Federal de Alagoas

Neste trabalho estudamos efeitos de Saturação na instabilidade modulacional de fibras de sílica dopadas com semicondutores apresentando não-linearidade de alta ordem. Várias funções de saturação para a contribuição não-linear no índice de refração são testadas na equação de Schroedinger não-linear. É observado que a frequência de modulação crítica e o espectro de ganho são sensíveis a forma precisa da função de saturação sempre que o modo transversal da luz incidente puder ser considerado como tendo uma distribuição homogênea sobre a seção transversal da fibra. Nos casos onde a inhomogeneidade espacial é considerada, diferentes funções de saturação levam a comportamentos semelhantes para a frequência de modulação e espectro de ganho.

CONVERSÃO ASCENDENTE DE ENERGIA EM VIDROS FLUORETOS DOPADOS COM Er^{+3}

NUNES, L. A. O.; REICHE, R.; CATUNDA, T.;

MESSADDEQ, Y.; AEGERTER, M. A.

*Instituto de Física e Química de São Carlos /
Universidade de São Paulo*

Investigamos as propriedades de conversão ascendente de energia de vidros fluoretos dopados com Er^{+3} (composição: 40 InF_3 - 20 ZnF_2 - 16 BaF_2 - (20 - x) SrF_2 - 2 GaF_3 - 2 NaF - x ErF_3 com x = 1, 2, 3 e 4 mol%). O estado $^4F_{9/2}$ foi excitado por um laser de Kr ($\lambda = 647$ nm) ou um laser de corante sintonizável em torno de $\lambda \sim 650$ nm e observamos uma forte luminescência no verde ($\lambda = 540$ nm) e fraca no azul ($\lambda \sim 400$ nm) correspondendo a emissão dos níveis $^4S_{3/2}$, $^2H_{11/2}$ e $^4H_{9/2}$. Estudamos o espectro de excitação na luminescência, sua dependência com a potência do feixe de bombeamento, os tempos de decaimento e evolução temporal do sinal.

PHOTOLUMINESCENCE AND OPTICAL ANISOTROPY OF A POROUS SILICON.

SURDUTOVICH, G. I.; BASMAJI, P.; VITLINA, R. Z.;

BAGNATO, V. S.

IFQSC/USP

KOLENDA, J.

Vilnius University, Lithuania.

MOHAJERI-MOGHADDAM, H.; PEYGHAMBARIAN, N.

Optical Scin. Center, Arizona, USA.

Porous silicon layers have been investigated using reflectance and photoluminescence (PL) techniques at room and liquid nitrogen temperatures. We observe a noticeable anisotropy of porous silicon samples. The measured parallel and normal components of the refractive index for samples with moderate porosity were 1.25 and 1.30, respectively. To detect the photoluminescence anisotropy we measured the PL's polarization under different polarizations of the excitation laser beam. Measurements were performed at the wavelength $\lambda = 650$ nm close to the PL peak. For an optically isotropic sample with isotropic photoluminescence the PL intensity would be proportional to the light intensity inside porous silicon sample, i.e. its transmittance coefficient. This suggest that the PL intensity must increase when the polarization of the incident beam changes from s to p, due to the increase of the transmittivity according to the Fresnel formulas. Experimentally, however, we observed very different picture. For the s- component of PL we saw the reduction of PL intensity when the incident beam polarization changed from s to p. The increase of the p-component of the PL intensity is greater than expected from the isotopic sample model. The observation of the p and s components of the PL above and below the isotopic model's level suggests the enhanced interaction of the normal electric field component with the porous silicon film. Possible mechanisms for the origin of the photoluminescence are discussed. The work is supported by FAPESP and CNPq.

CONVERSÃO ASCENDENTE DE FREQUÊNCIAS VIA AVALANCHE DE FÓTONS EM FIBRAS DOPADAS COM Pr^{3+}

MACIEL, G. S.; GOMES, A. S. L.; ACIOLI, L. H.;

ARAÚJO, C. B. DE

Departamento de Física - UFPE

A conversão ascendente de frequências obtida através do processo de *avalanche de fótons* foi inicialmente observada em cristais dopados com íons de Terras raras e mais recentemente em fibras ópticas também dopadas com Terras raras. O fenômeno é caracterizado por uma redução abrupta da transmissão do feixe de bombeamento acima de um valor crítico de intensidade e pelo comportamento temporal da fluorescência emitida. Neste trabalho, descrevemos um modelo onde o

mecanismo que inicia o processo de avalanche é explicado através de absorção de um fóton por um par de íons vizinhos. Usando equações de taxa, resultados teóricos para a transmissão, fluorescência e diferença de população em função da potência de bombeamento são obtidos, bem como a evolução temporal da fluorescência. Os resultados estão em bom acordo com os dados experimentais, conforme será descrito.

PERFIL DE MISTURA DE QUATRO ONDAS COM TRÊS CAMPOS FORTES RESSONANTES

CORREIA, R. R. B.; CUNHA, S. L. S.
UFRGS

Neste trabalho estuda-se os efeitos devidos ao caráter ressonante em técnicas espectroscópicas de mistura de quatro ondas utilizando três cores. A susceptibilidade de terceira ordem $\chi^{(3)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$ é analisada em termos das sintonias e amplitudes dos campos incidentes. Para isto utiliza-se a solução analítica obtida para campos fortes ressonantes, desenvolvida a partir do modelo de Dick e Hochstrasse (*Chem. Phys.* 75 (1983) 133). O resultado obtido reproduz o comportamento do sinal nos casos de um e dois campos fortes ressonantes, prevendo efeitos como os de deslocamento, alargamento e saturação do perfil da linhas, assim como o de interferência destrutiva entre coerências induzidas no meio não-linear. No caso de três campos fortes, a estrutura prevista passa a ter uma forma complexa, sendo analisada em detalhe neste trabalho em função da intensidade dos campos que acoplam os níveis. O perfil de duas linhas medidas experimentalmente são comparados a um ajuste realizado, indicando no perfil efeitos como deslocamento Stark ac e de interferência destrutiva.

GERAÇÃO DE TERCEIRO HARMÔNICO EM FIBRAS MONO-MODAIS DE SÍLICA DOPADAS COM GeO_2

NICÁCIO, D. L.; BORGES, N. M.; GOUVEIA, E. A.;
GOUVEIA-NETO, A. S.
Departamento de Física-UFAL

Geração de terceiro harmônico (TH) em fibras ópticas de sílica monomodais, com núcleo circular, dopadas com várias concentrações de GeO_2 foi estudado. As fibras foram bombeadas por pulsos provenientes de um laser de Nd:YAG operando em $1,319 \mu\text{m}$ com duração de 150 ps MLQS. Analisamos a dependência da intensidade do TH gerado em 439 nm (azul) com a potência de bombeio, concentração de GeO_2 , mínimo de dispersão e com o comprimento da fibra. Não foi necessário qualquer preparação prévia para obtenção do sinal em 439 nm. Estudos da intensidade do TH contra o comprimento mostram que existe um máximo em torno de 1 m. Em algumas fibras foi observada conversão ascen-

dente e em todos os casos estudados o TH é guiado no núcleo da fibra no modo fundamental LP_{01} .

SOLUÇÕES NÃO-LINEARES TIPO KEER NA PROPAGAÇÃO DE UM FEIXE DE LUZ

FREITAS, D. S.; MOURA, M. A. DE
Departamento de Física - UFPE

A aproximação paraxial comumente utilizada para descrever a propagação de um feixe de luz em um meio não linear, tipo efeito Kerr, leva a resultados paradoxais. M. Lax, partindo inicialmente das das equações de Maxwell desenvolveu um procedimento geral para obter correções para a solução paraxial expandindo o campo elétrico como uma série de potência em termos de um pequeno parâmetro unidimensional. Partindo deste procedimento utilizaremos o princípio variacional para obtermos o melhor feixe gaussiano para os termos de primeiras ordens das equações de Maxwell

BIREFRINGE DISPERSION AND INVERSION IN LYOTROPIC LIQUID CRYSTALS

SANTIN FILHO, O.; AMARAL, L. Q.
INSTITUTO DE FÍSICA - USP

The birefringence (Δn) of a nematic cylindrical lyomesophase N_c made of sodium dodecylsulfate/water/decanol has been measured by polarized interferometry and by optical microscopy (OM) in the wavelength λ interval 300-800 nm. The determination of $\Delta n \times \lambda$ by OM was carried out using an Ehringhaus compensator and a monochromator. Absorption spectra obtained in a spectrophotometer with a 400μ thick oriented sample, with director at 45° in relation to the optical axes of crossed polarizers, showed two well defined maxima and minima due to interference, allowing determination of Δn in four wavelengths¹. In the total curve $\Delta n \times \lambda$ an inversion of the optical signal is observed at 387.5 nm; $\Delta n > 0$ for smaller λ values and $\Delta n < 0$ for larger λ values. The experimental results are well fitted to a theoretical curve with two dispersion terms, due to ultraviolet and infrared absorption bands, of respectively positive and negative signals. The results explain the optical signal of lyonematics in the visible region as a consequence of the dominating IR absorption band.

1. O.Santin Filho and L.Q. Amaral, *J.Phys.Chem.* 97, 12107 (1993).

Work supported by CAPES.

GERAÇÃO DE LUZ VISÍVEL DE ALTA INTENSIDADE POR CONVERSÃO ASCENDENTE DE FREQUÊNCIA EM FIBRAS ÓPTICAS MONOMODO COM NÚCLEO DE SÍLICA PURA

VERMELHO, M. V. D.; GOUVEIA, E. A.; LYRA, M. L.; HICKMANN, J. M.; GOUVEIA-NETO, A. S.
Universidade Federal de Alagoas - UFAL

Apresentamos estudo experimental para geração de intensa luz visível em 580nm , com potência de pico da ordem de 20W , através de eficiente conversão ascendente de energia de um laser de Nd:YAG operado em $1.319\mu\text{m}$ em fibras ópticas monomodo com núcleo de sílica pura. A luz amarela gerada em 580nm propaga-se no modo LP_{02} com uma largura espectral de 3.5nm bem como uma certa assimetria com um deslocamento para as altas frequências. O mecanismo de conversão ascendente de frequência apresenta potência de limiar, que depende do comprimento da fibra, e um comprimento crítico de pouco mais de um metro para que o processo se inicie. A conversão da radiação fundamental em $1.319\mu\text{m}$ em luz visível em 580nm tem uma eficiência aproximada de $0,5\%$ em uma fibra com núcleo de sílica pura com 20m de comprimento e uma potência pico de 5.0kW .

Efeitos de Fase em Fibras Dobradoras de Frequência

LACERDA, M. M.; REIGADA, D. C.; CARVALHO, I. C. S.; MARGULIS, W.
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
LESCHÉ, B.

Universidade Federal do Rio de Janeiro

No processo de preparação para geração de segundo harmônico (SHG) em fibras ópticas uma rede periódica de $\chi^{(2)}$ é escrita através da interação das ondas fundamental e SH. Altas eficiências de conversão em um processo de quasi-casamento de fase requer que a relação de fase permaneça aproximadamente constante para muitos períodos da rede. Portanto, uma pequena perturbação da fase decresce significativamente a eficiência de SHG. Este fato é explorado na técnica de varredura de calor usada para investigar o efeito de modulação de fase em fibras dobradoras de frequência. Experimentos foram realizados alterando-se a potência ótica e a posição de um elemento térmico ao longo da rede de $\chi^{(2)}$ criada na fibra. A relação entre as contribuições dos efeitos de auto-modulação de fase (SPM) e modulação de fase cruzada (XPM) também foi investigada.

Modelamento dos Efeitos da Largura Espectral do Laser na Preparação de Fibras Dobradoras de Frequência

LESCHÉ, B.

Instituto de Física UFRJ

MENDONÇA, J. P. R. DE

Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Física UFJF

É conhecido que ao se irradiar uma fibra ótica de sílica dopada com Ge com luz coerente ($\lambda = 1064\text{nm}$) junto com a onda do segundo harmônico cria-se uma rede permanente de $\chi^{(2)}$ que pode ser usada para gerar o segundo harmônico num regime de quasi casamento de fases. Desenvolvemos um modelo macroscópico do processo de preparação de uma fibra dobradora de frequência e um método numérico de resolver o sistema de equações integro-diferenciais. O modelo considera as fases das ondas envolvidas. Analisamos especialmente efeitos causados pela largura espectral do Laser e encontramos que a largura espectral limita a extensão espacial da rede de $\chi^{(2)}$. Este resultado permite a seguinte interpretação: cada frequência do laser escreve uma rede diferente. A superposição destas redes resulta numa rede espacialmente limitada.

CdTe Quantum Dots Borosilicate Doped Glass for Optical Devices

SOLANO, V. C.; BARBOSA, L. C.; CESAR, C. L.; FRAGNITO, H. L.; CRUZ, C. H. B.; ALVES, O. L.; CRAIEVICH, A.
IFGW/Unicamp, LNLS/CAMPINAS/SP

We report in this work the preparation and optical characterization of CdTe quantum dots in a borosilicate doped glass. The quantum dots size was controlled by heat treatment time and temperature. We studied the evidences of quantum confinement and the effect of the pre-heat treatment on quantum dots size distribution and dispersion, both in CdTeS ternary alloy and CdTe binary alloy. We used SAXS measurements with synchrotron radiation and absorption spectroscopy as analytical tools of this work. Finally, we find with ternary alloy always, occurs nucleation and crystal growth at the same time. With heat treatment at glass transition temperature of the semiconductor doped glass we found that the size dispersion was more narrow. With binary alloy without this pre-heat treatment we observe quantum confinement effects that depend the temperature of heat treatment. With lower temperature of heat treatment occurs a more pronounced quantum confinement effect. With absorption spectra we evaluate the quantum dot size and we observe the stage of nucleation and crystal growth. With high heat treatment and time we observe coalescence stage. This study indicates that

these materials are the most promising for all-optical devices. TELEBRAS/FINEP/CNPq/FAPESP.

FISSÃO NÃO-LINEAR DE UM FEIXE ÓPTICO INDUZIDA POR MODULAÇÃO ESPACIAL CRUZADA

MA, H.; ARAÚJO, C. B. DE

Departamento de Física - UFPE

Serão apresentadas experiências que demonstram o fenômeno de fissão espacial sofrido por um feixe de sonda devido à presença de um outro feixe intenso. As medidas foram feitas em um meio não-linear auto-desfocalizador (vidro comercial Corning dopado com semicondutores). A fissão foi estudada em função da potência do feixe intenso (P). A separação angular entre os dois feixes resultantes da fissão depende linearmente de P para baixas potências mas apresenta saturação no limite de altas potências. A interpretação física deste fenômeno é baseada na variação não-linear do índice de refração da amostra que ocorre devido ao efeito de modulação espacial cruzada induzido pelo feixe intenso.

DINÂMICA DA EXPANSÃO ULTRA-RÁPIDA DE PLASMA EM SEMICONDUCTORES II-VI

CRUZ, J. M. R.; MONTE, A. F. G. DO

Universidade de Brasília

Uma alta densidade de portadores, espacialmente não homogênea, pode ser criada em semicondutores com a excitação produzida por um pulso ultracurto de laser. Observa-se experimentalmente que a densidade de portadores fotografados é muito menor do que a densidade estimada usando-se valores conhecidos do coeficiente de absorção, reflexão, difusão e recombinação. Experimentos recentes em semicondutores II-VI mostraram que o tempo de decaimento da densidade do plasma é menor do que 10 ps, é independente do gradiente de densidade local do plasma e é fortemente dependente da temperatura [1]. A explicação proposta para estas observações [1] assume a existência de uma rápida expansão do plasma através da recombinação de portadores por emissão estimulada, seguida pela reabsorção da radiação em regiões de baixa densidade. Neste trabalho investigamos esta hipótese através de um modelo teórico baseado em um sistema de dois níveis. [1] E. C. Fox e H. M. van Driel, Phys. Rev. B 47,1663 (1993).

Workshop: Óptica-Não Linear: Métodos, Materiais e Aplicações (OTI, SEM) - 09/06/94

Introdução

ÓPTICA NÃO-LINEAR: FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES

ARAÚJO, C. B. DE

Departamento de Física, UFPE, 50670-910 Recife-PE, Brasil

Com a invenção do laser, a resposta não-linear da matéria nas frequências ópticas passou a ser estudada em diferentes sistemas físicos tais como gases mono-atômicos, vapores moleculares, líquidos e sólidos, incluindo efeitos que ocorrem no interior da matéria e nas interfaces entre diferentes meios. O aparecimento dos lasers sintonizáveis permitiu utilizar efeitos não-lineares para a investigação das características da matéria desde o infravermelho até o ultravioleta mediante o desenvolvimento de várias técnicas espectroscópicas. Durante os últimos 15 anos o campo foi enriquecido com a descoberta de novos fenômenos, conceitos e técnicas que permitiram uma abrangência maior da área. Por um lado, os progressos conseguidos propiciaram o aumento do conhecimento básico em áreas tais como a Física Atômica e a Óptica Quântica. Por outro lado, ocorreram inúmeros avanços na Física da Matéria Condensada através do estudo de novos materiais tais como cristais foto-refrativos, semicondutores, polímeros orgânicos, vidros especiais e na tecnologia de lasers. Atualmente são conhecidos vários materiais que apresentam altas não-linearidades e resposta temporal ultra-rápida, e se dispõem de lasers e amplificadores operando em todo o espectro óptico. Apesar dos quase 35 anos de existência, o campo continua efervescente e existe um grande esforço de pesquisas em áreas fundamentais e aplicadas. Nesta palestra serão inicialmente introduzidos os conceitos e fenômenos básicos de Óptica Não-Linear. A seguir serão discutidos resultados que exemplificam projetos desenvolvidos recentemente na UFPE e que ilustram de certo modo algumas áreas de grande interesse atual. No primeiro exemplo serão discutidas experiências que evidenciaram pela primeira vez efeitos de interferência entre as polarizações de terceira e quinta ordem. Estes fenômenos que se manifestam no domínio espectral, foram observados em vidros dopados com semicondutores (VDS) mas também estão presentes numa larga variedade de materiais e permitirão desenvolver novas técnicas espectroscópicas para o estudo das não-linearidades de ordem superior. Os demais exemplos ilustram

a observação e a utilização de efeitos não-lineares que se manifestam no domínio espacial. Numa das experiências serão analisados os efeitos de "focalização induzida" e "instabilidade modulacional espacial" que ocorrem entre feixes ópticos co-propagantes num meio não-linear. Através destas experiências foi possível verificar predições baseadas na solução da equação não-linear de Schrödinger aplicada a meios desfocalizadores. Também será discutida a operação de um "modulador espacial" baseado no efeito de "deflexão induzida" que é sofrido por um feixe óptico devido à presença de um feixe de controle. Este dispositivo fotônico permite a transferência de modulação entre dois feixes com ganho de potência e com alta taxa de deflexão angular. Finalmente, serão analisadas experiências com VDS processados na forma de guias-de-ondas para ilustrar o uso deste material em Óptica Integrada.

Processos Não-Lineares em Fibras Ópticas

GOUVEIA-NETO, A. S.

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072/970 - Maceió - AL - Brasil

Fibras ópticas constituem-se em meios ideais para o estudo de processos não lineares, pois permitem a obtenção de altas densidades de potência em seus núcleos de dimensões micrométricas, utilizando-se fontes de luz com intensidades modestas. A propriedade de confinamento de luz pelas fibras ópticas também possibilita a utilização de longos comprimentos de interação, aumentando-se substancialmente a eficiência dos processos não lineares e tornando a dispersão cromática importante no processo. De um modo geral, os efeitos não lineares em fibras ópticas estão associados com a susceptibilidade de terceira ordem, exceto nos casos em que dopantes, introduzidos no núcleo de sílica das fibras, contribuem com termos de ordem superior para a não-linearidade total.

Inicialmente descreveremos os processos não-lineares ocasionados pela propagação não-linear dos pulsos de excitação no regime anômalo da dispersão da velocidade de grupo. Neste regime enfatizaremos mecanismos tais como: instabilidade modulacional, sólitons e sólitons Raman, além da influência de dopantes sobre estes mecanismos. Em particular, discutiremos a geração de pulsos de luz de alta intensidade com comprimentos de onda estendendo-se do visível ao infravermelho, através de processos não-lineares em fibras ópticas excitadas por pulsos de laser no infravermelho. Mostraremos que, com a escolha apropriada de comprimentos de fibras, é possível obter, simultaneamente com pulsos no infravermelho, pulsos de luz de alta intensidade na região visível. Neste caso chamaremos atenção para os processos de conversão ascendente de frequências por combinação simultânea de efeitos como espalhamento Raman estimulado, instabilidade modulacional e mistura paramétrica multifotônica direta e em cascata. Comentaremos também sobre a geração de terceiro harmônico em fibras dopadas com GeO_2 e $\text{GeO}_2:\text{Er}^{+3}$ e sobre a influência dos dopantes na propagação de pulsos ultra-curtos nas fibras.

NONLINEAR OPTICS: METHODS AND APPLICATIONS

GOMES, A. S. L.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife - PE - 50760-910

Nonlinear Optics has evolved throughout the years as an important branch of Optics. Many fundamental nonlinear optical phenomena studied since the early sixties - coincident with the advent of the laser - are now exploited as well established tools for the investigation of light-matter interactions. The result of these studies often give information about the microscopic and macroscopic structure of physical, chemical and biological systems. In this work, I review several nonlinear optical techniques and their applications. As it is practically impossible to cover all of the available techniques, the objective of the lecture will be to give a flavor of the principal methods employed in Nonlinear Optics. A summary table and a list of references are given, which will hopefully be useful for those starting in the field as well as a reference guide for other researchers. The following books are also very helpful: *The Principles of Nonlinear Optics*, Y. R. Shen (Wiley, 1984); *Introduction to Nonlinear Laser Spectroscopy*, M. D. Levenson (Academic Press, 1982); *Contemporary Nonlinear Optics*, G. P. Agrawal and R. W. Boyd (Academic Press, 1992).

Espectroscopia e Confinamento de Átomos (OTI) - 09/06/94

MANIPULAÇÃO ÓPTICA DO COMPRIMENTO DE ESPALHAMENTO: NOVAS PERSPECTIVAS PARA CONDESAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN EM ÁTOMOS FRIOS

BAGNATO, V. S.

Universidade de São Paulo - IFSC - DFCM

Condensação de Bose-Einstein (CBE) é uma das possibilidades de estudos quando produzimos átomos frios aprisionados. A menos de sistemas envolvendo átomos de hidrogênio polarizado, os demais sistemas atômicos são em geral interagentes (atrativos) produzindo um possível colapso do condensado⁽¹⁾. Este colapso pode ser evitado se houver uma maneira de promover uma blindagem óptica dos átomos, tornando-os como se fossem esferas duras impedindo o colapso do sistema. Neste trabalho apresentamos as primeiras evidências experimentais de que é possível produzir uma blindagem através do acesso óptico à estados repulsivos de forma adiabática. Experimentalmente observamos este efeito através de duas medidas distintas; ambas das quais consiste em supressão de canais inelásticos de colisões⁽²⁾. Mudanças do sinal do potencial, que corresponde à mudanças no sinal do comprimento de espalhamento, acarreta profundas modificações nas propriedades termodinâmicas do sistema. Tais modificações poderão constituir um método óptico para detecção de CBE. Suporte Financeiro: FAPESP, CNPq (1) A.J. Moerdijk et al - Phys. Rev. Lett 72, 40 (1994) (2) Um destes experimentos esta sendo apresentado em detalhes por L. Marcassa et al (Seção ATO)

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS COM DOIS E QUATRO FEIXES

LIMA, E. G.; CHESMAN, C.; OLIVEIRA, F. A. M. DE; TABOSA, J. W. R.; VIANNA, S. S.

Departamento de Física - UFPE

A armadilha magneto-ótica (AMO) usual é construída utilizando-se três pares mutuamente ortogonais de lasers circularmente polarizados e um campo magnético variável espacialmente [E.L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, e D.E. Pritchard, Phys. Rev. Lett. 59, 2631 (1987)]. Recentemente, uma nova AMO foi obtida [C. Chesman, E.G. Lima, F.A.M. de Oliveira, S.S. Vianna e J.W.R. Tabosa, Opt. Lett. (submetido)], com uma configuração bem mais simplificada, consistindo em apenas um par de lasers focalizados e o campo magnético. A força restauradora na direção transversal aos feixes é somente devido à pressão de radiação, enquanto que na direção longitudinal, o funcionamento é

semelhante ao da AMO convencional. Neste trabalho, apresentaremos simulações numéricas desta armadilha e discutiremos sua estabilidade. Também descreveremos os resultados para um segundo tipo de armadilha que se diferencia da anterior pela adição de mais um par de feixes ortogonal ao par focalizado. A armadilha com quatro feixes apresenta maior estabilidade que a de dois feixes. Comparações entre as simulações e resultados experimentais, obtidos em nosso laboratório, serão apresentadas.

ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS COM DOIS E QUATRO FEIXES DE LASERS

CHESMAN, C.; LIMA, E. G.; OLIVEIRA, F. A. M. DE; VIANNA, S. S.; TABOSA, J. W. R.

Departamento de Física - UFPE

Discutiremos a realização experimental de novas configurações tridimensionais estáveis para aprisionamento de átomos de césio em um vapor, que usa apenas dois ou quatro feixes de lasers. Espectroscopia de absorção foi usada para caracterizar ambos os tipos de armadilha e densidades de $2 \times 10^8 \text{cm}^{-3}$ e $1 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ foram medidas para as armadilhas de dois e quatro feixes respectivamente. O princípio da armadilha de dois feixes combina a força magneto-ótica longitudinal com a força espontânea transversal devido à pressão de radiação associada basicamente à geometria dos feixes. Esta análise teórica está em bom acordo com os resultados experimentais

Apoio financeiro: FINEP, FACEPE, CNPq e CAPES

Estudo Experimental de Átomos Aprisionados em Uma Armadilha Magneto-Óptica Próxima de Uma Superfície †

CHEVROLLIER, M.

Departamento de Física - UFPE

ORÍÁ, M. C. S.

Departamento de Física - UFPB

O comportamento de um átomo na vizinhança de uma superfície é modificado, em relação ao caso de um átomo livre, por causa das condições de contorno impostas pela superfície aos modos do campo eletromagnético do vácuo [1]. As consequências dessas modificações se refletem na taxa de emissão espontânea e em um deslocamento dos níveis de energia dos átomos próximos da superfície [2]. Em trabalhos anteriores [3] nós mostramos que a técnica espectroscópica de reflexão seletiva é uma ferramenta poderosa para observação espectral dos efeitos da atração de van der Waals exercida por uma superfície sobre átomos de um vapor térmico. Apresentamos nesse trabalho resultados experimentais preliminares ao estudo espectroscópico do sinal de reflexão entre uma superfície dielétrica e átomos frios. Em uma primeira configuração "clássica" de armadilha

magneto-óptica (AMO) a seis feixes [4], estudamos o comportamento da amostra em função da distância à superfície, e mostramos que a armadilha é ainda eficaz na superfície. As limitações dessa configuração para as experiências que nós pretendemos realizar são discutidas. Realizamos também uma AMO em uma configuração a quatro feixes que mostramos ser particularmente interessante para espectroscopia de reflexão. Finalmente abordamos as perspectivas para esse trabalho.

[1] S.Haroche and D.Kleppner, *Physics Today*, Jan.1989, p.24

[2] D.Meschede, *Physics Reports* 211 (5),1992

[3] M.Oriá et al, *Europhys. Lett.* 14, 527 (1991)

[4] C.Chesman et al, trabalho apresentado nesse encontro † Trabalho realizado no Grupo de Ótica IFQSC - USP

RADIATIVE DAMPING AND SEMICLASSICAL DESCRIPTION OF A TWO-LEVEL ATOM

GHINER, A. V.; SURDUTOVICH, G. I.
IFQSC/USP

Several types of optically rarefied discrete physical systems when characteristic (or minimal) distance between the radiators already is comparable with the light wavelength λ but the collective, i.e. local field, effects in a radiation else very important, are known nowadays. The most striking examples are resonant rarefied cooled gas and composite media. In the first case the polarizability $\alpha = \alpha' + i\alpha''$ of a separate radiator is large, ($\sim \lambda^3$), due to the resonance and in the second case the effective radiator's polarizability may be enhanced due to the large size of inclusions into a host homogeneous medium. By use of a generalized integral equations method we had calculated the refractive indexes in the both of these cases. Unlike optically dense media, described by Lorentz-Lorenz formula, in those conditions the refractive index has an imaginary part even for the systems composed from radiators with purely real polarizability $\alpha = \alpha'$. It means the effective amplification in the medium collected from the "unexcited" radiators. For a better insight into this seeming "violation" of the energy conservation law we considered the limiting case of a rarefied medium - an isolated radiator in the field of the incident plane wave. With the account of the interference effects a total energy flux through the sphere around the radiator turns out to be proportional $|\alpha|^2 - \frac{3}{2} \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^3 \alpha''$, i.e. is positive even for $\alpha'' = 0$. Actually really passive radiator always have a positive imaginary part $\alpha'' > 0$ due to the radiation damping effect. We deduced a novel form of the known density matrix equation for a two - level system with proper account of the radiation damping. The connection with quantum theory of radiation is discussed.

The work is supported by FAPESP and CNPq.

EXHIBITION OF THE RESONANT COOLED GAS INTERNAL STRUCTURE BY MEANS OF THE OPTICAL SUSCEPTIBILITY MEASUREMENTS.

GHINER, A. V.; BAGNATO, V. S.; SURDUTOVICH, G. I.
IFQSC/USP

According to the classical Lorentz - Lorenz formula susceptibility depends on the product $N\alpha$ only. Here N is the density and α is the polarizability of a separate radiator. Local field effects play the role when the parameter $N\alpha$ is not too small and usually it coincides with "dense medium" condition: $N\lambda^3 \gg 1$. For resonance gas local field parameter may be essential even for rarefied medium with $N\lambda^3 \leq 1$. This discreteness manifests itself through the parameter kb , where $k = 2\pi/\lambda$ and b is the minimal distance between atoms. For ordinary-gas b is much less the average distance $N^{-1/3}$. But for resonance gas parameter $kb \geq 1$. By use of a general approach [1] we calculated refractive index n ($n-1 \ll 1$) of such gas.

$$n - 1 = 4\pi N\alpha(1 - N\alpha\beta' + 2N\alpha''\beta'') \quad (1)$$

where

$$\beta' = \pi \left[1 + \left(\frac{4}{(kb)^2} - 1 \right) \cos 2kb - 2 \left(\frac{1}{(kb)^2} - 1 \right) \frac{\sin 2kb}{kb} \right]$$

$$\beta'' = \pi \left[2kb - \frac{2}{kb} - \frac{2}{(kb)^3} + 2 \left(\frac{1}{(kb)^2} - 1 \right) \frac{\cos 2kb}{kb} + \left(1 - \frac{4}{(kb)^2} \right) \sin 2kb \right].$$

For small $kb \ll 1$

$$\beta' = -\frac{4\pi}{3} \left[1 - \frac{11}{10}(kb)^2 \right], \quad \beta'' = \frac{8\pi}{9}(kb)^3$$

When the nonlinear dependence n from the parameter $N\alpha$ may be measured Eq.(1) predicts an opposite, compared with Lorentz-Lorenz formula, sign of nonlinearity. For $N\alpha \sim 10^{-3}$ we obtain value of $\Delta n \sim 10^{-5} - 10^{-6}$. This effect may be enhanced by the parameter L/λ , where L is trap's size. It gives a reasonable estimation $\Delta n \sim 10^{-2}$.

1. A.V. Ghiner and G.I. Surdutovich, *Phys. Rev. A*, **49**, 1313 (1994).

Ótica Quântica, Imagens e Holografia (OTI) - 09/06/94

O HAMILTONIANO QUADRÁTICO DEPENDENTE DO TEMPO: GERAÇÃO DE "SQUEEZED" E O PROCESSO DISSIPATIVO/AMPLIFICAÇÃO.

MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y.
UFSCar

Considerando-se o hamiltoniano quadrático dependente do tempo $H(a^\dagger, a, t) = f_1(t)a^\dagger a + f_2(t)a^{\dagger 2} + f_2^*(t)a^2 + f_3(t)a^\dagger + f_3^*(t)a$, onde $f_2(t)$ compreende o campo de bombeamento externo, e $f_3(t)$ forças estocásticas que simulam ruídos na cavidade ($f_1(t)a^\dagger a$), procedemos ao estudo do processo dissipação/ amplificação segundo o procedimento de Caldirola⁽¹⁾-Kanai⁽²⁾-Havas⁽³⁾. Para tal, no âmbito de um regime fracamente amortecido, resolve-se a equação de Schrödinger, através da diagonalização por invariantes, e obtem-se o operador de evolução, essencial à representação de Heisenberg. Através do cálculo das flutuações nas quadraturas, pudemos avaliar a geração dos estados "squeezed" através do processo de dissipação/amplificação, bem como abordar esta competição segundo a análise da energia média e correlações temporais das quadraturas e de intensidades. Soluções analíticas destas quantidades físicas, abrangendo situações especiais, são apresentadas junto ao domínio ressonante, enquanto que, fora deste, técnicas numéricas foram utilizadas para a esquematização gráfica dos comportamentos enfocados. 1. P.Caldirola, Nuovo Cimento 18, 393 (1941). 2. E.Kanai, Prog. Theor. Phys. 3, 440 (1948). 3. P.Havas, Nuovo Cimento Suppl. 5, 363 (1957).

O OSCILADOR QUÂNTICO DISSIPATIVO REVISITADO

BRITO, A. L. DE; BASEIA, B.
UFPB

A inclusão da dissipação é importante tanto na teoria clássica quanto na teoria quântica, especialmente na ótica, onde o laser é um sistema aberto. No entanto, mesmo na primeira, ao nível do formalismo lagrangeano ou hamiltoniano, encontramos algumas dificuldades. No caso quântico estas dificuldades aumentam. Dois tratamentos bastante distintos têm sido usados na literatura. O primeiro⁽¹⁾ propõe uma hamiltoniana t-dependente para descrever o sistema aberto, dissipativo. A segunda⁽²⁾, propõe descrever o sistema aberto pela interação com um reservatório de perdas, a hamiltoniana agora sendo para o sistema inteiro, que é fechado, conservativo. Com isto a hamiltoniana global fica sendo t-independente, mais hipóteses subsidiárias, adicionais, são assumidas para o reservatório, geral-

mente fictício. Neste trabalho propomos um modelo e abordagem alternativos para descrever o sistema dissipativo, através do acoplamento com um único oscilador fictício. Embora apresente algumas dificuldades, tal como nos tratamentos anteriores, o procedimento é bastante simplificado em relação aos demais, através de uma hamiltoniana que, como anteriormente, não representa a energia, mas gera a equação dissipativa correta, como a de Langevin para o movimento Browniano.

1. P.Caldirola, Nuovo Cimento 18, 393 (1941); E.Kanai, Prog. Theor. Phys. 3, 440 (1948); R.W.Hasse, Rep. Prog. Phys. 41, 1027 (1978); P.Croxon, Phys. Rev. A49, 588 (1994).
2. R.J.Glauber, In Quantum Optics, Proceeding of the Enrico Fermi School (1969); W.H.Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation, Wiley (1972); I.Pedrosa e B.Baseia, Phys. Rev. D30, 765 (1984).

TÉCNICA DE INTERFEROMETRIA DE "SPECKLE-SHEARING" APLICADA À METROLOGIA ÓPTICA

RODRIGUES, E.; MURAMATSU, M.

Instituto de Física da USP

LUNAZZI, J. J.

Instituto de Física da UNICAMP

Shearografia é um método óptico a laser, originalmente desenvolvido para medida de deformação. Ao contrário da holografia que mede deslocamentos da superfície, a shearografia mede a derivada desses deslocamentos. Neste trabalho, iluminamos (por dupla exposição) uma placa metálica (fixa em suas extremidades) com um laser. Entre as exposições a placa metálica é deformada. Os raios espalhados pela placa são captados por uma câmera fotográfica de características particulares. Metade do campo da lente (objetiva) da câmera é coberto por uma cunha de vidro, cuja função é fazer com que dois pontos vizinhos do objeto interfiram em um único ponto no plano imagem. Apesar da holografia e da shearografia serem métodos que proporcionam a análise de campo todo e sem contato, a shearografia apresenta algumas vantagens com relação à holografia. Estas podem ser resumidas a seguir: 1-Requer um arranjo óptico simples, eliminando assim, o problema de alinhamento. 2-É moderada quanto à exigência de isolamento e variações térmicas. 3-O comprimento de coerência é reduzido. 4-Proporciona uma maior e mais controlável faixa de sensibilidade. 5-O meio de registro pode ter resolução baixa.

Neste trabalho ao invés de usarmos como dispositivo "shear" uma cunha de vidro, construímos uma cunha de água e apresentamos alguns resultados usando como objeto, uma placa metálica circular e outra quadrada. Posteriormente faremos o estudo das deformações residuais de um circuito impresso sujeito a ciclos térmicos.

MEDIDA DA ÁREA DE COERÊNCIA EM LUMINESCÊNCIA PARAMÉTRICA DE CONVERSÃO DESCENDENTE.

RIBEIRO, P. H. S.; MONKEN, C. H.; BARBOSA, G. A.
UFMG

A conversão paramétrica descendente (LPCD) em cristais não lineares, é um fenômeno que revela um novo tipo de fonte de luz, com propriedades bastante especiais. Neste trabalho, apresentamos a medida da área de coerência da luz emitida por esta fonte. A área de coerência de uma fonte de luz é um parâmetro importante na descrição das propriedades de coerência espacial do campo eletromagnético produzido por esta fonte, por isto, este parâmetro está diretamente ligado à função de correlação entre os campos na superfície da fonte. A medida é feita através da realização da experiência de Young com fenda dupla e obtenção dos padrões de interferência. Estes padrões são ajustados por equações que nos fornecem a visibilidade das franjas de interferência. Estas visibilidades obtidas dos dados experimentais são comparadas a previsões teóricas para fontes espacialmente incoerentes, e além disto, quando ajustamos a geometria da montagem de tal forma que a visibilidade se anula, sabemos que a separação entre fendas é igual a uma das dimensões da área de coerência. Desta forma, a área é medida e comparada à previsão teórica.

ESTUDO DAS PROPRIEDADES DE COERÊNCIA ESPACIAL EM LUMINESCÊNCIA PARAMÉTRICA DE CONVERSÃO DESCENDENTE ESTIMULADA.

RIBEIRO, P. H. S.; PÁDUA, S. DE; SILVA, J. C. M. DA; BARBOSA, G. A.
UFMG

A luminescência paramétrica de conversão descendente (LPCD) é um processo de conversão descendente de frequência da radiação eletromagnética, que ocorre em cristais não lineares. O processo de emissão da luz convertida, pode ser espontâneo e também estimulado. No processo de emissão estimulada, um campo externo é acoplado a um ou mais modos convertidos do campo produzido pelo cristal e a emissão neste modo é estimulada. Um fato interessante neste processo é que como dois feixes são produzidos na LPCD, se estimulamos um feixe, o seu conjugado também será estimulado e mais, levará consigo as propriedades de coerência do campo estimulador. As propriedades de coerência temporal induzidas na luz estimulada, têm sido parte principal ou importante de trabalhos recentes. (Veja por exemplo J. O. S. A. B 5, 978-980 (1991)) Neste trabalho, nos propomos a estudar as propriedades de coerência espacial induzidas na luz estimulada. Para isto, observamos a visibilidade dos padrões de interferência produzidos em

uma experiência de Young com esta luz, em função da intensidade do campo estimulador. Alguns dados preliminares já obtidos são apresentados e também a teoria para o processo é discutida com a ajuda de cálculos também preliminares já concluídos.

Interferência de Young com estados de dois fótons

PÁDUA, S.; RIBEIRO, P. H. S.; SILVA, J. C. M. DA; BARBOSA, G. A.
Universidade Federal de Minas Gerais

Experimentos com fendas de Young, tendo como fonte de luz um cristal não linear gerando fótons gêmeos através da Luminescência paramétrica, foram realizados no nosso laboratório (veja comunicação oral neste encontro). Dando prosseguimento a este trabalho faremos um experimento de Young com luz no estado de dois fótons. Fótons gêmeos "signal" e "idler" degenerados em frequência, produzidos pelo cristal não linear bombeado por um laser de U. V., serão combinados em um separador de feixes 50/50, de tal maneira que os fótons transmitidos ou refletidos ocuparão os estados de Fock 0 ou 2. Em seguida, um dos feixes será incidido em uma fenda de Young e mediremos a intensidade do padrão de interferência usando técnicas de contagem de fótons. Apresentaremos detalhes da montagem experimental e possivelmente, medidas preliminares. Financiados por FINEP, FAPEMIG e CNPQ.

ACOPLAMENTO DE FASE NA MISTURA DE DUAS ONDAS EM CRISTAIS FOTORREFRATIVOS.

FREJLICH, J.; GARCIA, P. M.; FRESCHI, A. A.
Laboratório de Óptica - IFGW - UNICAMP

A gravação de um holograma em materiais reversíveis e de registro em "tempo-real" como é o caso dos cristais fotorrefrativos produz efeitos de "auto-difração" que em geral modificam o padrão de luz que está sendo registrado, o que por sua vez altera o holograma que está sendo gravado e assim por diante num processo realimentado que pode chegar a ser bastante complexo. A teoria de ondas acopladas de Kogelnik adaptada para estas condições dinâmicas de gravação prevê dois tipos de acoplamento entre os feixes incidentes por causa desta realimentação na gravação de um holograma: acoplamento de intensidade e acoplamento de fase. O primeiro resulta nos já bem conhecidos experimentos de amplificação da luz. O acoplamento de fase deveria produzir curvaturas nos planos de equi-fase dos hologramas gravados. Essa curvatura foi prevista teoricamente há 15 anos mas nunca foi confirmada experimentalmente. Descrevemos os experimentos preliminares que estão sendo desenvolvidos em nosso Laboratório para confirmar a presença dessa curvatura e que podem contribuir

para compreender melhor o comportamento destes materiais.

CALCULATIONS ON DIFFRACTED IMAGES OF 3D OBJECTS

LUNAZZI, J. J.; OCAMPO, J. M. J.
Universidade Estadual de Campinas

We calculated numerically and without employing approximations the position of first order diffracted images for the case of a 3D object observed under white light. The monochromatic case was generalized to the continuous visible spectrum case as in [1], but employing faster and more precise computational programs. The photographic image was compared to an ideal stereophotography obtained when the camera revolves around the object as in [1] but a new consideration was made concerning the distance between the camera and the point of revolution. It generates a more accurate relationship between the holophotographic image and its stereophotographic equivalence. An application is proposed for this kind of images: the study of aniseikony in ophthalmology by choosing convenient color interference filters for each eye of the observer [2].

References:

- 1) "Holophotography with a diffraction grating", J.J. Lunazzi, *Opt. Eng.* V29, N1, 15-18 (1990).
- 2) G. Molesini, *Optica Acta*, 1983, V30, N6, 705-706.

PHOTOREFRACTIVE RESPONSE TIME MEASUREMENT IN GaAs CRYSTALS USING PHASE MODULATION IN TWO-WAVE MIXING

BIAN, S.
Harbin Institute of Technology, Harbin, China
FREJLICH, J.
UNICAMP

We describe a new method for photorefractive response time measurement in fast photorefractive crystals based on continuous phase modulation techniques in two-wave mixing (2WM). Based on the temporal evolution equation of the first harmonic complex amplitude in the space charge field of the hologram and the low diffraction efficiency assumption we derived the equation of dependence of the photorefractive hologram on modulation frequency. We report experimental results for semi-insulating GaAs that are in good agreement with theory. Values obtained for the response time and photoelectron generation quantum efficiency are consistent with data in literature. This method is particularly suited for fast photorefractive materials like GaAs where conventional hologram erasure techniques are difficult or require very special equipment.

POTENCIAIS NÃO LOCAIS COMO GERADORES DE "SQUEEZING"

DANTAS, C. M. A.; BAGNATO, V. S.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP
BASEIA, B.
Universidade Federal da Paraíba

Potenciais não locais foram introduzidos na literatura por volta de 1930 por Wataghin, que estendeu para a física a equação integro-diferencial de Volterra. Tendo sido adequado para explicar várias situações físicas, eles encontraram aplicações em vários campos da física, principalmente em física nuclear. No presente trabalho nós revemos o problema dos potenciais não locais, porém com uma motivação diferente: investigando a equivalência entre um potencial não local e um potencial dependente da velocidade, nós mostramos como construir potenciais não locais os quais podem constituir uma importante classe de potenciais que podem apresentar o efeito "squeezing". Neste contexto mostra-se que, enquanto a coerência vem da parte diagonal do potencial não local $V(x,x')$, o efeito "squeezing" emerge da sua parte não diagonal. Fazemos uma breve discussão dos resultados obtidos e damos sua interpretação.

COMPRESSÃO NUM MODELO DE JAYNES-CUMMINGS ESTENDIDO: MONOMODO E QUATRO-NÍVEIS

ROVERSI, J. A.; BARRANCO, A. V.
UNICAMP

São analisadas a compressão e o caráter sub-Poissoniano num modelo Jaynes-Cummings estendido para descrever a interação do campo de radiação com um sistema de quatro-níveis. O estado do sistema sendo composto pelo produto direto dos estados atômicos e estados binomiais do campo eletromagnético. Os estados binomiais tem a propriedade de interpolar entre os estados coerentes, que são os estados puros "mais clássicos" permitidos na teoria quântica, e os estados de número, que se constituem nos principais representantes dos estados não clássicos da luz. O comportamento temporal da compressão do campo eletromagnético bem como a variação da compressão em função do parâmetro de interpolação binomial.

ANÁLISE VIBRACIONAL DE TRANSDUTORES DE ULTRA-SOM PIEZOELÉTRICOS POR ESPI EM TEMPO MÉDIO.

FERREIRA, G. M.

Instituto de Física da USP - Instituto de Oftalmologia

Tadeu Cvintal

MURAMATSU, M.

Instituto de Física da USP

O espalhamento de luz coerente por superfícies opticamente rugosas, isto é com rugosidade da ordem do comprimento de onda da luz, fornece um padrão de interferência de alto contraste denominado 'speckle' ou granularidade óptica. Este se caracteriza pela invariância temporal e espacial, guardando assim informações sobre a superfície em estudo. O registro de hologramas de objetos difusos por câmera de TV, seguido do processamento digital da imagem obtida é denominado 'Eletronic Speckle Pattern Interferometry' ou ESPI. Esta técnica possibilita em tempo real medidas interferométricas de deslocamentos, gradiente de deslocamentos e vibrações. Este trabalho exhibe o ESPI aplicado a transdutores de ultra-som piezoelétricos sujeitos a tensão senoidal, detectando frequências ressonantes e suas respectivas regiões nodais. O processamento digital do interferograma é exemplificado e os resultados são discutidos e comparados com a modelagem vibracional destas estruturas pelo método de elementos finitos.

SÍNTESE NUMÉRICA DE HOLOGRAMAS BINÁRIOS PARA INTERCONEXÕES ÓTICAS

TEIXEIRA, F. L.; CARVALHO, M. DE C.

IPD/CTEx

A geração de múltiplos feixes de luz de diferentes intensidades, obedecendo a uma determinada distribuição espacial sobre uma matriz 2-D e a partir de um único feixe têm grande importância em computação digital ótica ("all digital optical computing"), circuitos de telecomunicações com fibra ótica e processamento de imagens. Elementos óticos difrativos, como hologramas, são mais eficientes para atingir tal objetivo. Contudo, hologramas sintetizados por técnicas convencionais como, por exemplo, através da exposição múltipla da interferência entre o feixe de entrada e cada um dos

feixes de saída em um meio holográfico não são capazes de gerar um grande número de spots com a eficiência de difração desejada. Torna-se necessária, portanto, a utilização de uma técnica numérica para o cálculo do holograma. Neste trabalho, é implementado um método de síntese baseado no algoritmo "simulated annealing", estudando-se a dependência do processo de convergência frente à taxa de decaimento da temperatura. São sugeridas também, novas alternativas para a estratégia de otimização. A reprodutibilidade e miniaturização do elemento holográfico envolvido depende das técnicas de fabricação utilizadas. Técnicas de litografia por feixe eletrônico são capazes de gerar bons resultados, requerendo, entretanto, que a síntese gere um holograma binário ou com poucos níveis de quantização. Neste trabalho os filtros sintetizados são binários com transmitância $t(x,y) = +/- 1$.

Evolução de estados coerentes em fibras com não-linearidade saturável e a geração de superposição quântica de estados macroscópicos

LYRA, M. L.; GOUVEIA-NETO, A. DA S.

Departamento de Física - Universidade Federal de Alagoas

Neste trabalho estudamos a evolução de um estado inicialmente coerente do campo eletromagnético que se propaga em um meio Kerr com não-linearidade saturável. Utilizando o formalismo de distribuição de fase quântica, analisamos a dependência da configuração de fases do sinal de saída com a amplitude do campo incidente. Obtivemos que a saturação da não-linearidade do meio introduz efeitos de interferência que comprometem a observação de componentes macroscopicamente bem distinguíveis do estado final. A relevância do presente resultado na possibilidade de observação experimental de estados de Schroedinger utilizando-se fibras de vidro dopadas com semicondutores é discutida.

Ótica Quântica (OTI) - 10/06/94

CHAVES QUÂNTICAS, GATOS DE SCHRÖDINGER E TELEPORTAÇÃO

DAVIDOVICH, L.

Departamento de Física - PUC-Rio

Uma questão importante da Mecânica Quântica refere-se à possibilidade de interferência quântica entre estados macroscopicamente distintos (gato de Schrödinger "vivo" ou "morto"). Nessa palestra, serão discutidas propostas de experimentos que viabilizam a produção e detecção de superposições coerentes de estados mesoscópicos distintos

de campos eletromagnéticos em cavidades. Esses experimentos, que utilizam técnicas recentemente desenvolvidas em Óptica Quântica, permitem a medida do tempo de decoerência, e o acompanhamento do processo pelo qual a superposição quântica transforma-se em uma mistura estatística clássica. Em particular, é possível obter estados correlacionados do campo eletromagnético em cavidades distintas. Mostraremos como esses estados podem ser utilizados para teleportar um estado quântico, de um átomo não necessariamente conhecido, de uma cavidade para outra. Será discutida também a conexão dessa questão com o problema da construção de "chaves quânticas".

Referências:

M. Brune, S. Haroche, J. M. Raimond, L. Davidovich e N. Zagury, "Manipulation of Photons in a Cavity by Dispersive Atom-Field Coupling: Quantum-nondemolition Measurements and Generation of 'Schrödinger Cat' States", *Phys. Rev. A* **45**, 5193 (1992).

L. Davidovich, A. Maali, M. Brune, J. M. Raimond e S. Haroche, "Quantum Switches and Non-Local Microwave Fields", *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2360 (1993).

INDISTINGUIBILIDADE FORÇADA NO FENÔMENO DE COERÊNCIA INDUZIDA SEM EMISSÃO ESTIMULADA

BARBOSA, G. A.
UFMG

O fenômeno de *coerência induzida sem emissão estimulada*, que não possui análogo clássico, é analisado na condição onde dois cristais não-lineares ($\chi^{(2)}$) são alinhados de maneira que as emissões "idler" são colineares e estão dentro de uma cavidade óptica tipo anel e com perdas. Os fótons "idler" gerados pelo cristal 1 ou cristal 2 são indistinguíveis por pertencerem ao modo da cavidade. A indistinguíbilidade forçada destes fótons dentro da cavidade produz interferência entre os fótons "signal", em propagação livre fora da cavidade, quando estes são superpostos. Esta interferência é *independente* das perdas e altamente *dependente* da posição dos cristais dentro da cavidade. O máximo grau de visibilidade obtido neste padrão de interferência é de $\mathcal{V}^{(2)} = 1$ e reflete a coerência induzida *simultaneamente* em ambos cristais pelo campo da cavidade. Esta experiência será realizada e espera-se atingir valores para $\mathcal{V}^{(2)}$ acima dos valores experimentais já publicados ($\mathcal{V}^{(2)} \leq .5$) para o fenômeno de *coerência induzida sem emissão estimulada*.

CONTROLE DA VISIBILIDADE DAS FRANJAS DE YOUNG COM MEDIDA DE COINCIDÊNCIA

RIBEIRO, P. H. S.; PÁDUA, S. DE; SILVA, J. C. M. DA; BARBOSA, G. A.
UFMG

O uso de cristais não lineares produzindo luminescência paramétrica de conversão descendente (LPCD) como fontes de luz, se deve ao fato de que esta fonte é a *única* capaz de produzir fótons gêmeos. Isto significa que tal fonte produz pares de feixes cujos fótons são altamente correlacionados temporalmente. Neste trabalho, utilizamos estas propriedades de correlação temporal entre fótons de dois feixes gêmeos da LPCD para observar

os padrões de excesso de coincidência quando se coloca uma fenda dupla no caminho de um dos feixes. Estes padrões são obtidos para várias geometrias do sistema. Através deste esquema de detecção em coincidência, demonstramos que é possível detectar interferência, ou seja, uma visibilidade diferente de zero para as curvas de excesso de coincidências, em condições tais que isto não seria possível para padrões de intensidade. Além disto, demonstramos que é possível controlar esta visibilidade não localmente através do feixe conjugado ao feixe que atravessa as fendas.

COLLAPSES & REVIVALS CLÁSSICOS

OLIVEIRA, F. A. M. DE; LIMA, E. G.
Departamento de Física - UFPE

O fenômeno de *collapses & revivals* (CR's), observado experimentalmente em meados da década passada [G. Rempe, H. Walther, e N. Klein, *Phys. Rev.* **58**, 353 (1987)], é considerado ser de origem puramente quântica, i.e., sem análogo clássico ou semiclássico, atestando a discreteza da energia do campo eletromagnético. Neste trabalho, é mostrado que fenômenos aparentemente semelhantes aos CR's, podem ser obtidos em um sistema que é o análogo *completamente* clássico do modelo de Jaynes-Cummings. Utilizando o formalismo dos colchetes de Poisson, as equações de movimento são obtidas e a partir delas a dinâmica é simulada numericamente para um ensemble finito de sistemas com condições iniciais aleatórias. A média de ensemble da evolução das grandezas físicas é calculada, de forma semelhante ao que é feito experimentalmente. Recentemente, foi desenvolvido um modelo quântico de interação entre luz e átomo no qual a presença de uma interação paramétrica dentro da cavidade fez aparecer um novo tipo de CR's na energia total (campo + átomo), sendo este um fenômeno puramente quântico [E.G. Lima, e F.A.M. de Oliveira, *Phys. Rev. A* (submetido)]. No análogo clássico aqui simulado, a energia total não apresenta tais oscilações, corroborando a

conclusão anterior [*ibid*] de serem, estes novos CR's, fenômenos puramente quânticos.

Amplificação de Ruído em Meios Dispersivos Não Lineares

CAVALCANTI, S. B.

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

AGRAWAL, G.; YU, M.

The Institute of Optics, University of Rochester

A propagação de um feixe de luz parcialmente coerente num meio dispersivo não linear é investigada teoricamente através de um modelo de difusão de fase para o feixe de um laser. Mostra-se que a instabilidade modulacional é responsável pela amplificação do ruído no regime de dispersão anômalo, enfatizando as flutuações de fase, causando distorção espectral assim como degradação da coerência. Sob certas condições as flutuações de fase exibem oscilações temporais que dão origem às bandas laterais típicas de instabilidade modulacional. A equação não linear de Schrödinger também é resolvida numericamente para o estudo do regime de propagação no qual a teoria analítica perde a validade.

PROPRIEDADES ESTATÍSTICAS NÃO CLÁSSICAS DOS ESTADOS BINOMIAIS

BARRANCO, A. V.; ROVERSI, J. A.

UNICAMP

Serão analisadas as propriedades estatísticas não clássicas dos estados binomiais do campo eletromagnético. Os estados binomiais são definidos como tendo uma distribuição de número de fótons do tipo binomial. O principal ingrediente de nossa análise é o fato de que esses estados podem ser usados para interpolar entre os estados coerentes, que são os estados puros "mais clássicos" permitidos na teoria quântica, e os estados de número, que se constituem nos principais representantes dos estados não clássicos da luz. Propriedades tais como compressão (segunda e quarta ordem), e caráter sub-Poissonianos serão discutidas. Através da utilização de distribuições de quasiprobabilidade no espaço de fase, como a função Q , por exemplo, mostramos de que maneira ocorre a transição entre aqueles dois estados fundamentalmente diferentes, e fornecemos, ao mesmo tempo, uma explicação da origem do fenômeno da compressão nos estados binomiais. As propriedades de fase do campo preparado num estado binomial também serão discutidas.

Ótica Não-Linear na Matéria Condensada (OTI) - 10/06/94

"REFLECTION Z-SCAN": UM NOVO MÉTODO PARA ESTUDOS DE PROPRIEDADES DE SUPERFÍCIES

PETROV, D.; GOMES, A. S. L.; ARAÚJO, C. B. DE
Departamento de Física - UFPE

A técnica de "Z-scan" tornou-se um dos mais métodos eficazes para caracterização da parte real da susceptibilidade não linear de terceira ordem em materiais ópticos. A técnica aplica-se a materiais transparentes, e baseia-se na modificação do perfil espacial de um feixe óptico que é monitorado através de uma abertura colocada na região de campo distante. Neste trabalho apresentamos uma nova variação da técnica de Z-scan aplicável a materiais com alta absorção e que tem a vantagem de dar informação sobre efeitos de superfície do material. A técnica explora a modificação do perfil espacial do feixe refletido pela amostra. Nós aplicamos o método no estudo de efeitos de superfície em vidros dopados com semicondutores, e resultados experimentais e teóricos serão apresentados.

A técnica de varredura-z em absorvedores saturáveis

OLIVEIRA, L. C. DE; CATUNDA, T.; ZÍLIO, S. C.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Os bem conhecidos materiais ópticos não lineares: rubí, alexandrita e $GdAlO_3:Cr^{3+}$ são usados para investigar a aplicabilidade da técnica de varredura-z à absorvedores saturáveis com tempos de respostas longos e submetidos à radiação c.w. A curva de transmitância da varredura-z para uma variação de fase arbitrária é obtida através de um formalismo alternativo baseado na avaliação numérica da integral de difração de Kirchhoff. Tal formalismo leva em conta a saturação do meio, o que não ocorre com o formalismo originalmente desenvolvido para a técnica [1], o qual não se aplica de forma satisfatória à absorvedores saturáveis. Adicionalmente é proposto uma modificação na técnica experimental mediante a modulação eletro-mecânica da radiação incidente o que permite, ponto a ponto, a eliminação dos efeitos lineares.

[1] M. Sheik-Bahae, A.A. Said e E.W. Van Stryland, *Opt. Lett.* 14, 955(1989).

EFEITOS DE DISPERSÃO EM MISTURA DEGENERADA DE QUATRO ONDAS EM CRISTAIS DE $GdAlO_3:Cr^{3+}$.

IMPINNISI, P. R.; CATUNDA, T.
*Instituto de Física e Química de São Carlos /
 Universidade de São Paulo*

A técnica de mistura de quatro ondas não-degenerada foi aplicada em cristais de $GdAlO_3:Cr^{3+}$. Dois feixes do mesmo laser de Ar (514 nm) foram utilizados para bombear ressonantemente uma das bandas de absorção do íon Cr^{3+} , formando assim uma rede de população induzida. Estudamos a dependência da eficiência de espalhamento desta rede em função do comprimento de onda de um feixe de prova oriundo de lasers de Ar, Kr e He-Ne ($\lambda = 676, 647, 568, 531, 514$ e 488 nm). Através da medida de eficiência de espalhamento obtivemos a dependência espectral da diferença entre a polarizabilidade do íon Cr^{3+} nos estados excitado e fundamental. Nossos resultados podem ser explicados através de um modelo de um único oscilador: a transição para a banda de transferência de carga. Através deste modelo obtivemos a energia desta banda e sua força de oscilador.

GERAÇÃO DE TERCEIRO HARMÔNICO EM FIBRAS MONOMODO DE SÍLICA CODOPADAS COM GeO_2 E Er^{+3} .

HICKMANN, J. M.; GOUVEIA, E. A.;
 GOUVEIA-NETO, A. S.
Departamento de Física - UFAL
 DINI, D. C.; CELASCHI, S.
CPqD/Telebrás

Compararemos a geração de terceiro harmônico em uma fibra monomodo de sílica, com núcleo circular, dopada com GeO_2 e outra fibra, com as mesmas características, mas codopada com GeO_2 e Er^{+3} . Para tanto os pulsos com duração de 100ps de um laser de Nd:YAG operando em $1.319\mu m$, com acoplamento de modos e chaveamento Q ("QS-ML"), são injetados nestas fibras, gerando luz azul-violeta no comprimento de onda de 439nm, que corresponde ao terceiro harmônico do fundamental. Os espectros da luz violeta gerada mostram linhas com larguras espectrais menores que 0.4nm, tanto para a luz coletada do final da fibra quanto para a luz coletada ao longo da fibra, para ambas as fibras. Na fibra dopada apenas com GeO_2 observamos um crescimento do terceiro harmônico com a potência três da intensidade do fundamental. No entanto, na fibra dopada com GeO_2 e Er^{+3} o crescimento observado foi com a potência quatro da intensidade do fundamental, sugerindo um processo de amplificação do terceiro harmônico pelos íons de Érbio presentes na fibra.

FLUORESCÊNCIA ANTI-STOKES EM VIDROS FLUORO-INDATOS DOPADOS PRASIODÍMIO

ARAÚJO, L. E. E. DE; GOMES, A. S. L.; ARAÚJO, C. B. DE
Departamento de Física - UFPE
 MESSADDEQ, Y.; FLOREZ, A.; AEGERTER, M. A.
USP - São Carlos

Vidros fluoro-indatos foram recentemente identificados como excelentes materiais para construção de amplificadores ópticos e lasers baseados em fibras dopadas com íons de Terras Raras. Estes vidros apresentam transparência superior aos vidros fluorozirconatos e são mais estáveis ao ataque pela humidade. Neste trabalho apresentamos resultados de conversão ascendente de frequências (*frequency up-conversion*) em fluoro-indatos dopados com Pr^{3+} . A geração da fluorescência anti-Stokes ($^3P_0 \rightarrow ^3H_4$) resulta da transferência de energia entre pares de Pr^{3+} excitados via absorção $^3H_4 \rightarrow ^1D_2$. Será apresentado um estudo do comportamento dinâmico do processo. Os resultados experimentais são comparados com um modelo baseado em equações de taxa para população dos estados envolvidos.

CONTROLE ELETRO-ÓPTICO DE DISPOSITIVOS BIESTÁVEIS ASSOCIADOS EM CASCATA

MONTEIRO, C.; ADABO, G. J.; RODRIGUES, P. J. C.; OLIVEIRA, J. E. B.
CTA - ITA - IEEC

O estudo de dispositivos ópticos híbridos com comportamento não linear tem sido desenvolvido por vários grupos de pesquisas do exterior desde meados da década de 70. No Brasil pesquisadores do ITA realizam estudos na área de biestabilidade óptica utilizando o efeito eletro-óptica linear (efeito Pockels) em cristais de $LiNbO_3$. Os resultados experimentais obtidos apresentam boas concordâncias com as previsões teóricas. Nesta comunicação técnica apresenta-se uma configuração de dispositivo óptico híbrido constituída de dois moduladores eletro-ópticos de amplitude e realimentados associados em cascata. Esta configuração proporciona grande flexibilidade no controle de transmitância do dispositivo. Por exemplo obtém-se comportamento óptico biestável com curvas características controlável. As características obtidas com a configuração proposta podem ser utilizadas em várias aplicações tecnológicas como, por exemplo, limitador óptico e chaveador de pulsos. As vantagens desta configuração comparativamente às outras já existentes são discutidas neste trabalho.

Lasers, Guias de Onda e Espectroscopia Atômica (OTI) - 10/06/94

DETECÇÃO SIMULTÂNEA DOS SINAIS OPTOGALVÂNICO E DE FOTOIONIZAÇÃO A MÚLTIPLOS PASSOS PARA O URÂNIO

DESTRO, M. G.; NERI, J. W.; SILVEIRA, C. A. B. DA; SCHWAB, C.; RODRIGUES, N. A. S.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

MIRAGE, A.

IPEN/CNEN - São Paulo - SP

Desde que seja possível descrever o sinal optogalvânico em função do fluxo de fótons incidentes, é possível, em princípio, determinar a intensidade de saturação da transição envolvida a partir de medidas experimentais do sinal optogalvânico em função do fluxo de fótons incidentes. Para investigar a possibilidade da aplicação da detecção optogalvânica, utilizando-se lâmpadas de catodo oco de urânio, na determinação da intensidade de saturação de transições é necessário examinar a dependência do sinal optogalvânico em relação ao fluxo de fótons incidentes para várias transições do urânio. Contudo, devido a altas densidades de níveis de energia que ocorrem em átomos pesados, tais como o urânio, transições multifotônicas podem facilmente ocorrer e complicar a interpretação dos efeitos de saturação bem como a compreensão dos espectros obtidos. A partir de medidas simultâneas dos sinais optogalvânico e de fotoionização a múltiplos passos mostra-se que ocorre uma transição multifotônica para a transição 5915,39 Å do urânio.

UTILIZAÇÃO DE LÂMPADAS DE CATODO OCO DE ÓXIDO DE URÂNIO EM ESPECTROSCOPIA OPTOGALVÂNICA

NERI, J. W.; DESTRO, M. G.; SCHWAB, C.;

RODRIGUES, N. A. S.; PEREIRA, F. S.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

MIRAGE, A.

IPEN/CNEN - São Paulo - SP

Neste trabalho é discutida a utilização de lâmpadas de catodo oco de óxido de urânio em espectroscopia optogalvânica. Estas lâmpadas são mais comumente desenvolvidas com urânio metálico. Em experimentos de separação isotópica de urânio, nos quais estas lâmpadas podem ser utilizadas, um laser de corante é sintonizado nas transições eletrônicas do átomo do isótopo ^{235}U . Devido à dificuldade de se obter urânio metálico e pelo fato de ser mais fácil obter o óxido, U_3O_8 , construímos uma lâmpada de catodo oco deste óxido. São apresentados os resultados das experiências onde são comparados os espectros de emissão e sinal optogalvânico de lâmpadas construídas com urânio metálico e óxido de urânio. Estes mostram a inviabilidade da utilização de

lâmpadas de catodo oco de óxido de urânio como instrumento de sintonia do laser de corante na espectroscopia optogalvânica.

LASER DE VAPOR DE COBRE REFRIGERADO A AR

ANAZAWA, R. M.; RODRIGUES, N. A. S.; RIVA, R.; YUM, K. K.; RIBEIRO, A. L.; WAHLBUHL, C. A. R. S.; SCHWAB, C.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

Dando continuidade ao programa de desenvolvimento de lasers do Instituto de Estudos Avançados do Centro Técnico Aeroespacial (IEAv/CTA), principalmente na classe de lasers de vapor metálico (mais especificamente o de cobre), estamos desenvolvendo um novo tipo de Laser de Vapor de Cobre (LVC). A sua aplicação mais importante no IEAv/CTA tem sido a excitação de lasers de corante (Rhodamina 6G), cuja finalidade é de utilização específica no projeto de separação isotópica via laser. Outras aplicações, tais como holografia, fotografia de eventos rápidos, sistemas de amplificação, projeção de imagens, pesquisa em semicondutores e, mesmo em medicina, são também possíveis com este laser. Normalmente, os lasers de vapor de cobre convencionais são refrigerados a água. As modificações introduzidas no novo laser são: a substituição das flanges refrigeradas a água por flanges aletadas refrigeradas por pequenos ventiladores e a retirada da camisa d'água de alumínio que serve para retirar o calor gerado no meio ativo. O objetivo deste trabalho é apresentar o projeto e a construção de um LVC excitado por descarga longitudinal refrigerado a ar, bem como alguns resultados preliminares obtidos com o primeiro protótipo desenvolvido em nosso laboratório.

OPTICAL PUMPING OF METASTABLE MAGNESIUM ATOMS IN A BEAM

GOMIDE, J. V. B.

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp

BEVERINI, N.; DEL TREDICI, S. D.; MACCIONI, E.;

MESSINA, A. M.; STRUMIA, F.

Dipartimento di Fisica, Università di Pisa

CAI, W. Q.

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics,

Academic Sinica

The fine structure transitions between the metastable ^3P levels atoms of magnesium can represent a useful reference for an atomic frequency standard with superior performances. A prototype of atomic clock was realized in the past few years at the Istituto "Galileo Ferraris", in Turin, and a stability $\sigma(t) \leq 8 \times 10^{-12}$ was estimated. An important limitation factor in the actual apparatus is due to the presence in the detection region in front of the photomultiplier of a consistent fraction of atoms excited in the $^3\text{P}_1$ level by the discharge, that

have not yet decayed to the ground state because of its long lifetime. This background can be strongly reduced if the atoms are optically pumped out of the 3P_1 level, before entering the interrogation region, by laser radiation resonant with a transition leaving from that level. In this paper we will present the experimental results that we have obtained by optical pumping the Mg metastable atoms using the $^3P_1-^3D$ transitions at 383 nm, and we will analyse the advantage of this pumping scheme, in particular from the point of view of the application to the frequency standard. Preliminary results was presented in the XV Encontro Nacional de Matéria Condensada. The pumping radiation is generated using Exalite 392 dye in a single mode ring laser or by a frequency doubled diode laser. Almost all the atoms are pumped out of the 3P_1 level, which means an improvement of one order of magnitude in the stability of the Mg clock. A doubled frequency doubled diode laser is being mounted at Pisa to be tested in the prototype at Turin.

ESPECTROSCOPIA DE SATURAÇÃO EM AMOSTRAS OPTICAMENTE ESPESSAS

QUEIROZ, E. V.; MARCASSA, L. G.; BAGNATO, V. S.; ZILIO, S. C.

Universidade de São Paulo - IFQSC - DFCM

Nas espectroscopias de alta resolução, bem como no aprisionamento de átomos neutros por pressão de radiação faz-se necessário uma referência que forneça com precisão a frequência do laser com relação à frequência natural do sistema. A espectroscopia de saturação vem, há algum tempo, sendo utilizada para este fim; porém a possibilidade de se utilizar esta referência para estabilizar o laser levou-nos a procurar uma maneira de refinar a técnica. Neste trabalho, então, apresentamos um estudo teórico sobre a dependência da largura de linha com o comprimento da célula. Analisamos esta dependência através da lei de Beer-Lambert. Tendo em mente que a saturação não é uniforme ao longo da célula, pois há um decaimento da intensidade do laser de bombeio concluímos que o coeficiente de absorção (α) não tem um comportamento linear. Atrvés de simulações numéricas que levam em conta a não linearidade de α com a intensidade analisamos a dependência da largura de linha em função do comprimento da célula. Os resultados mostram que o aumento no comprimento da célula gera um estreitamento da largura de linha e sob certas condições (comprimento de células muito grandes), a largura de linha mostrou-se menor que a largura de linha natural. No momento estamos obtendo resultados experimentais preliminares. Suporte financeiro: FAPESP, CNPq

ACOPLAMENTO NÃO-LINEAR EM GUIAS DE ONDA CANAL

GARCIA, C. R. S.; CESAR, C. L.

Instituto de Física - IFGW - UNICAMP

Guias de ondas do tipo canal, em substratos vítreos, têm despertado grande interesse em óptica integrada, como a possibilidade de chaveamento óptico. O surgimento de novos materiais com alto índice de refração não-linear, da ordem de $10^{-10} \text{ cm}^2/\text{W}$, permite a fabricação de chaves ópticas onde o acoplamento não-linear é o mecanismo que chaveia. No ano passado apresentamos um programa que desenvolvemos para estudar Guias de Onda Planares. Neste programa fizemos adaptações que nos permite caracterizar os Guias de Onda Canal quanto ao número de modos guiados nas geometrias TE e TM, e também determinar imediatamente o comprimento de acoplamento. Apresentaremos um estudo, com simulação, mostrando principalmente o método utilizado, assim como alguns resultados fundamentais como comprimento de acoplamento e sua variação em função da intensidade do pulso. Será mostrado uma idealização de um sistema de multiplexação e demultiplexação de pulsos com chaveamento óptico baseado no comportamento não-linear do índice de refração.

BEAM QUALITY EVALUATION IN CAVITY MODE MODELING USING THE SECOND MOMENT METHOD

RODRIGUES, N. A. S.; ANAZAWA, R. M.

Centro Técnico Aeroespacial, Instituto de Estudos Avançados, São José dos Campos - SP

It is proposed that the second moment method for the M2 factor calculation, proposed for experimental laser beam characterization, is more convenient for beam quality evaluation in theoretical resonator mode computations than the traditional method, that consists on comparing beam divergences. This paper presents the results of mode calculation, using a modified Fox-and-Li-like numerical code, for two convenient resonators and compare the beam divergences and the M2 factors. The first optical cavity is an ordinary negative branch unstable resonator and the second is a Self Filtering Unstable Resonator, using the same pair of mirrors, placed at the same distance apart, for both situations. It is shown that the M2 method is a very synthetic way to describe the beam quality and, besides that, the method of comparing divergence can be tricky and sometimes can hide important beam properties.

AMPLIFICADOR TRANSVERSAL PARA LASER DE CORANTE PULSADO

MENEZES, L. DE S.; BARTHEM, R. B.
UFRJ

Em um grande número de aplicações de lasers, o meio amplificador é contido pela cavidade, atuando como re-alimentador e seletor de modos, isto é, fazendo parte do oscilador. No entanto, é possível usar o meio amplificador independentemente da cavidade ressonante, como um simples amplificador da radiação de saída. As grandes larguras de banda e o poder de amplificação tornam os amplificadores de corante bastante adequados ao que se propõem. Porém, ao contrário dos lasers de estado sólido, os de corante não podem armazenar pulsos de energia com duração maior que alguns nanossegundos, tempo correspondente à vida média do estado singleto das moléculas do corante. Conseqüentemente, os amplificadores de lasers de corante não são bem recomendados para a geração de pulsos com potências extremamente altas; no entanto funcionam muito bem na amplificação de sinais fracos em intensidades moderadas. Dois tipos de amplificadores são discutidos neste trabalho: o longitudinal e o transversal, sendo feito um breve exame de suas características.

FABRICAÇÃO DE LASER DE POÇO QUÂNTICO TENSIONADO DE InGaAs/GaAs EMITINDO EM 0,98 MICRONS PARA BOMBEAMENTO DE FIBRA ÓPTICA DOPADA COM ÉRBITO.

MACHADO, A. M.; SACHS, A. C.; GOBBI, A. L.; GIANANTE, M.; PARADISI, A.; MARTINS, R. B.; R. FILHO, J.; BERNUSSI, A. A.
CPqD - TELEBRÁS - CAMPINAS - SP

Com a consolidação dos amplificadores ópticos à fibra no cenário das comunicações ópticas, aumentaram os trabalhos de desenvolvimento dos lasers de potência com emissão em $0,98 \mu\text{m}$ para bombeamento destes dispositivos. Com este objetivo fizemos laser de poço quântico simples tensionado de InGaAs/GaAs com camadas confinantes de GaInP, todas crescidas por MOCVD sobre substrato de GaAs. Utilizamos uma estrutura de confinamento lateral tipo RIDGE. Para a otimização do dispositivo foram feitos modelamentos da estrutura ridge incluindo espalhamento de corrente, difusão de portadores na camada ativa, cálculo de guiamento, ganho e corrente limiar do dispositivo. Os principais melhoramentos conseguidos foram: redução da densidade de corrente limiar, redução da resistência térmica, redução da divergência e astigmatismo da emissão laser, aumento da eficiência externa e da potência onde ocorre degradação catastrófica. Os dispositivos fabricados até agora estão operando em modo contínuo emitindo potências de até 25 mW sem apresentar indício de degradação. A corrente necessária para atingir esta potência é de 150 mA.

INSTABILIDADES DE POLARIZAÇÃO EM GUIAS-DE-ONDA MAGNETO-ÓPTICOS

ARAÚJO, L. E. E. DE; ARAÚJO, C. B. DE
Departamento de Física - UFPE

Guias-de-ondas magneto-ópticos apresentam anisotropia devido ao "stress" que surge durante sua preparação. Esta anisotropia combinada com a birrefringência não-linear induzida por um feixe óptico intenso que se propaga através do guia, dá origem a instabilidades na polarização do feixe. Tais efeitos podem comprometer o desempenho dos dispositivos baseados nestes guias. Neste trabalho estudamos a evolução do estado de polarização da luz em um guia usando o formalismo de modos-acoplados que permite descrever o comportamento da polarização de forma análoga ao movimento de um pêndulo não-linear. O controle da instabilidade é feito por um campo magnético estático. Os resultados são aplicáveis à construção de portas lógicas e discriminadores de intensidade que operam na região de $1,5 \mu\text{m}$.

SPATIOTEMPORAL STRUCTURES IN A LASER WITH SATURABLE ABSORBER

ALCANTARA JR, P.
Instituto de Física - UFRGS
BARSELLA, A.; ARIMONDO, E.
Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Pisa, Italy

Spatiotemporal dynamics in quantum optics has been subject of recent interest in the formation of structures in the transverse distribution of the laser optical field with strong analogy with hydrodynamics. We present a model and experimental results for spatiotemporal structures observed in the cross section of the beam of a CO₂ laser with saturable absorber. The nonlinear system of differential laser equations was solved assuming a Gaussian beam profile without diffraction effect. The results show bifurcations leading to changes of transverse modes related to the symmetry-breaking, in agreement with our experimental results for the mode family $q = 1$. Evidence of secondary bifurcation, with a rotating mode was obtained in the numerical simulations at first time to the our knowledge with period of the order of relaxation times in the CO₂ lasers. Owing to the incoherent pumping mechanism (dc-discharge) in this lasers the principal physical process in the destabilization of the stationary states of the patterns is the cross-saturation between two Hermite-Gauss modes TEM₀₁ and TEM₁₀.

CARACTERIZAÇÃO DA ANISOTROPIA ÓPTICA EM GUIAS DE ONDA PLANARES

MENDES, S. B.; PAKTER, R.; HOROWITZ, F.

Instituto de Física - UFRGS

O desenvolvimento de guias de onda e outros componentes ópticos a filme fino, com os avanços alcançados nas últimas décadas nas técnicas de projeção para sistemas multicamadas e no controle dos parâmetros de deposição, tem crescentemente se apoiado no conhecimento das constantes ópticas dos filmes. Entretanto, resultados por diferentes métodos de caracterização têm geralmente mostrado uma correlação limitada entre si. Uma questão aí identificada é a relevância da microestrutura em que se formam os filmes no valor de suas constantes ópticas, assim como na sua própria interação com a luz nos processos ópticos de medida. Neste contexto, sob o aspecto da anisotropia, este trabalho visa analisar comparativamente medidas pelos Métodos das Envoltórias e dos Modos Guiados em recobrimentos de PbF_2 e CeO_2 , considerada explicitamente sua microestrutura.

REFLECTOMETRIA ÓPTICA DE BAIXA COERÊNCIA

SILVA, J. A. P. DA; WEID, J. P. V. D.; PROLA JÚNIOR, C. H.

CETUC - PUC - RJ

A reflectometria óptica de baixa coerência baseia-se no registro de franjas de interferência em um interferômetro de Michelson, quando a diferença de caminhos ópticos entre os dois braços se aproxima de zero. Quanto maior o conteúdo espectral da fonte luminosa, menor a região em que podem ser observadas as franjas de interferência. Desse modo, usando-se fontes de espectro largo, é possível obter-se resoluções micrométricas, necessárias a caracterização de dispositivos opto-eletrônicos. O sistema proposto é totalmente integrado em fibra óptica, com uma topologia inovadora em que o dispositivo a ser testado encontra-se fora do interferômetro. Uma comparação com os resultados obtidos anteriormente mostra que tanto a resolução quanto a margem dinâmica do sistema apresentam valores muito satisfatórios. Vários lasers foram medidos com esta técnica, fornecendo valores de distâncias fibra-laser, comprimentos de cavidades, e inclusive medidas de dispersão dos modos TE e TM.

Este trabalho foi realizado sob a égide do contrato PUC-Telebrás 513/93

Estudos sobre Crescimento de Filmes Finos de Oxidos Metálicos produzidos por reações Termoquímicas induzidas a Laser

PÉREZ, J. L.; LIMA, M. B. S.; LIMA, C. A. S.

Grupo de Estudos e Processamento de Materiais com Lasers - UNICAMP

Apresentamos resultados obtidos com filmes metálicos de Titânio ($\sim 1000 \text{ \AA}$), suportados em substratos de vidro, expostos a irradiação com pulsos de um laser de Nd:YAG (duração dos pulsos $t_0 = 290 \text{ ns}$, frequência de repetição $f = 200 \text{ Hz}$ e intensidades variando de 4,7 a 6,4 MW/cm^2). A amostra, montada em um translador XY, controlado a microcomputador, exposta ao ar, desloca-se com velocidade constante de 2mm/s, sob o foco do laser, gerando trilhas sobre o filme de Ti. O exame micro-topográfico das trilhas (Micro-perfilômetro Tencor Instruments) revela relêvos associados ao crescimento de filmes finos (~ 900 a 4000 \AA) com perfis transversais que seguem de perto o perfil espacial gaussiano do pulso laser e, conseqüentemente, da distribuição de temperatura na superfície irradiada de Ti. Os filmes foram identificados como sendo formados por TiO_2 e resultam de reações de termo-oxidação a laser do Titânio em presença de O_2 (ar). A temperatura máxima na superfície, no foco do laser, foi estimada em $T = 1300 \text{ K}$, compatível, portanto, com o limiar térmico para aquela reação ($T = 1200 \text{ K}$). Admitindo um modelo parabólico para a taxa de reação conseguimos obter uma expressão fechada, calculável por integração numérica, para a espessura do filme de oxido, em função da intensidade do laser ou, equivalentemente, da temperatura máxima na superfície metálica. A curva teórica assim obtida é comparada com as medidas experimentais, revelando-se uma excelente concordância (ver figura).

ESTUDIO DEL EFECTO DE LA GANANCIA NOLINEAL EN LAS CURVAS DE VISIBILIDAD DE UN LASER SEMICONDUCTOR SOMETIDO A REALIMENTACION OPTICA EXTERNA

MASOLLER, C.; CABEZA, C.; SCHIFFINO, A. S.

Universidad de la Republica - Uruguay

Se estudia el efecto de variar el parametro de saturacion en la ganancia, utilizando el modelo teorico de Lang y Kobayashi para un laser semiconductor sometido a realimentacion optica externa. Las curvas de visibilidad obtenidas teoricamente son comparadas con las curvas obtenidas experimentalmente, encontrandose un muy buen ajuste para distintos valores de la intensidad de realimentacion. Se encuentra ademas que una curva experimental puede ajustarse con una curva teorica de dos formas distintas: usando ganancia lineal y disminuyendo la intensidad de realimentacion respecto al valor experimental, o bien usando el valor de intensidad de realimentacion experimental y variando el parametro de saturacion.

AQUECIMENTO DE UM PLASMA COM LASERS NA PRESENÇA DE CAMPOS ELETROSTÁTICO E MAGNETOSTÁTICO CRUZADOS

GOYA, A.; FONSECA, A. L. A.; NUNES, O. A. C.
UnB

Calculamos a taxa de aquecimento de um plasma com um laser e com dois lasers, um fraco e outro forte, na presença de campos eletrostático e magnetostático cruzados. Os lasers são tratados como ondas eletromagnéticas planas na aproximação de dipolo e os elétrons do plasma são descritos pela solução da equação de Schrödinger para um elétron sob ação de campos lasers na presença de campos eletrostático e magnetostático cruzados. Utilizamos o método das transformações unitárias para simplificar o cálculo da função de onda, consideramos o processo de muitos fótons via Bremsstrahlung inverso e calculamos a taxa de transição para o limite ultra-quântico, isto é, $n = 0$ para $n = 1$. Constatamos que a presença do campo elétrico faz com que haja um aumento na taxa de aquecimento, tanto no processo com um laser quanto no processo com dois lasers, devido a presença da velocidade de arrasto na equação da energia. Concluímos que o processo Bremsstrahlung inverso na presença de campos eletrostático e magnetostático cruzados utilizando dois lasers -um fraco e outro forte - pode ser uma das formas mais eficientes para aquecer um plasma.

EVAPORAÇÃO DE FILME ANTI-REFLETOR DE SiO_x EM LASERS DE SEMICONDUTOR

CATUNDA, T.; SCHAMMASS, A.; PEDRO, C. R.
IFQSC/USP

Os lasers evaporados apresentam uma corrente de limiar aproximadamente duas vezes maior que as do laser original (antes da evaporação). Quando o laser evaporado é colocado na configuração de cavidade externa, com uma rede de difração Littrow, sua corrente limiar fica da ordem do valor do laser original. Medidas da refletividade do filme anti-refletor pelo método de Hakki e Paoli indicam uma refletividade $\sim 0.6\%$. Atualmente estamos trabalhando na otimização das condições de evaporação do FAR e na medida do intervalo de sintonia dos lasers evaporados na configuração de cavidade externa. Construímos um amplificador síncrono que será utilizado na estabilização ativa da frequência destes lasers.

CARACTERIZAÇÃO DE UM LASER DE Nd:YLF BOMBEADO POR LASER DE ARGÔNIO E DETERMINAÇÃO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE EMISSÃO ESTIMULADA

MALDONADO, E. P.; RANIERI, I. M.; VIEIRA JUNIOR, N. D.; MORATO, S. P.

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN-SP
Supervisão de Materiais Optoeletrônicos*

A caracterização de meios laser ativos de estado sólido, durante a ação laser, consiste em informação fundamental para a otimização do processo de obtenção destes meios. Contrariamente aos sistemas laser bombeados por lâmpadas, os lasers bombeados por outros lasers consistem em sistemas de análise razoavelmente simplificada, por possuírem a geometria de bombeio espacialmente bem determinada. Realizou-se uma caracterização de um laser de Nd:YLF bombeado colinearmente por um laser de argônio, utilizando-se um modulador acústico-óptico como elemento de perdas variáveis. O laser utiliza um cristal de Nd:YLF crescido em nossos laboratórios. A análise dos parâmetros obtidos na caracterização permitiu uma avaliação da qualidade do cristal assim como a obtenção do valor da seção de choque de emissão estimulada, para a transição com $\lambda_0 = 1,047 \mu\text{m}$. O valor determinado para esta seção de choque correspondeu a $1,5(5) \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2$, que é um valor em acordo com os reportados na literatura.

LASER C.W. DE Nd:YAG CHAVEADO PASSIVAMENTE COM CRISTAIS DE LiF:F_2^-

ROSSI, W. DE; COSTA, F. E. DA; RANIERI, I. M.; MORATO, S. P.

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/SP
C.P. 11049, CEP 05422-970, São Paulo-SP*

O uso de corantes como chaveadores passivos para lasers pulsados, apesar de algumas desvantagens, é bastante utilizado e conhecido, principalmente pelo seu baixo custo e simplicidade. A utilização dos centros de cor F_2^- em cristais de LiF como absorvedores saturáveis para lasers pulsados de neodímio apresenta uma série de vantagens em relação aos corantes. Aproveitando a experiência prévia com estes absorvedores, obtivemos o chaveamento passivo de um laser CW de Nd:YAG, fabricado pelo próprio grupo, o qual emite pulsos de até 26 KW de potência pico e 60ns de largura temporal. Os resultados obtidos com vários modos de operação e com várias transmissões do cristal serão mostrados e discutidos.

ANÁLISE ESPECTRAL DO MECANISMO DE ENCURTAMENTO DE PULSOS EM UM LASER MODE-LOCKED COM CAVIDADE ACOPLADA VAZIA

WETTER, N. U.; VIEIRA JR, N. D.
IPEN-CNEN/SP

Incluimos o conceito da refletividade efetiva de uma cavidade acoplada a um laser de Nd:YAG nos critérios de auto-consistência do regime de travamento de modos. Derivamos uma teoria simples no domínio espectral que

explica a compressão temporal dos pulsos mode-locked. Duas equações centrais demonstram a necessidade de que todos os modos do envelope espectral do pulso apresentem um ganho líquido unitário tanto quanto uma fase líquida igual a zero. Através deste novo entendimento elaboramos um experimento simples que resultou num fator dois na compressão temporal do pulso (51 ps). Demonstramos excelente concordância entre os resultados experimentais, obtidos com a cavidade aco-plada vazia, e a nossa análise teórica.

**PROJETO DE OBJETIVAS
INFRAVERMELHO PARA MÍSSIL
INTELIGENTE**

CARVALHO, M. DE C.; YOSHIOKA, C. R. T.
IPD/GTEz

A ótica empregada em sistemas inteligentes de mísseis requer uma série de compromissos envolvendo sensibilidade, resolução e simetria. Neste trabalho são fornecidas as metodologias gerais para o projeto de objetivas empregadas como olho sensor infravermelho de mísseis considerando-se tais compromissos. O trabalho parte de uma configuração alcançada a partir de um sistema simplificado clássico. Tal sistema consiste basicamente de uma cúpula, um espelho primário curvo de primeira superfície, um espelho secundário plano de primeira superfície, uma lente corretora, um retículo modulador no plano focal e um detector. Variações das propriedades óticas do espelho primário, do espelho secundário e a utilização de uma lente corretora são consideradas. Com a utilização desta última, pode-se obter um sistema com todas as aberrações primária nulas, isto é, sem aberração esférica primária, isento de coma e de astigmatismo, sem curvatura de campo e com aberração cromática desprezível.

**CONTROLLABLE ALL-OPTICAL FIBRE
COUPLER BASED ON EVANESCENT
LIGHT COUPLING**

KAWASE, L. R.
CEPEL e CETUC/PUC-Rio
RIBEIRO, R. M.; MARGULIS, W.
Dept. Física/PUC-Rio
MISOGUTI, L.
IFQSC/USP-São Carlos
LIDGARD, A.
Ericsson-Sweden

We present the technological feasibility of an all-fibre-optic controllable coupler. Typical optical couplers present a fixed value for coupling ratio, but depending on the system, this characteristics can be troublesome. In this work we report the observation of an all-optical fibre device where coupling ratio is controlled by light. The device is based on the effect of evanescent light coupling from the fibre to a semiconductor, changing

its complex refractive index. Thus, some amorphous semiconductors (e.g. α -Si, α -Si:H and α -SiC:H) deposited on the flat surface of a D-fibre, can be affected by light which propagates inside the fibre. Depending on the semiconductors, pump and probe light characteristic, the probe signal coupling ratio can be controlled.

**GERAÇÃO DE SEGUNDO HARMÔNICO
RESSONANTE POR DOIS FÓTONS EM
ÁTOMOS DE RYDBERG**

VIANNA, S. S.; TABOSA, J. W. R.; OLIVEIRA, F. A.
M. DE
Departamento de Física - UFPE

A geração de segundo harmônico tem sido observada numa grande variedade de sistemas atômicos, apesar deste processo ser proibido por dipolo elétrico devido às regras de seleção relacionadas com a paridade. Diferentes modelos teóricos envolvendo mecanismos como: transições de multipolos, ionização de átomos em campos intensos ou colisões atômicas, têm sido utilizados para explicar este efeito não linear. Para alguns sistemas, existe um bom acordo entre os cálculos teóricos e os valores experimentais, entretanto, em muitos experimentos é difícil identificar qual o mecanismo específico responsável por este efeito. Neste trabalho apresentamos medidas da dependência da polarização e do perfil espacial do feixe de segundo harmônico, gerado por estados de Rydberg, em vapor de Rubídio. A assimetria observada no feixe gerado, a partir da excitação ressonante por dois fótons, envolvendo estados p e d , indicam que um campo elétrico estático induzido por laser constitui o mecanismo dominante para criar o feixe de segundo harmônico coerente.

Apoio financeiro: FINEP, FACEPE e CNPq.

**ESPECTROSCOPIA DE ÁTOMOS DE
CÉSIO FRIOS**

CHESMAN, C.; VIANNA, S. S.; TABOSA, J. W.
Univ. Federal de Pernambuco

Diversas técnicas espectroscópicas de alta resolução em vapores atômicos têm sido desenvolvidas no sentido de eliminar o alargamento Doppler. Em especial, discutiremos a produção de uma amostra de átomos de Césio (^{133}Cs) frios em uma Armadilha Magneto Óptica (AMO), capturados a partir de uma pequena célula de quartzo contendo o vapor de Césio. Um laser de Ti-Safira foi utilizado para esfriar e aprisionar os átomos da célula e um laser de diodo estabilizado com grade (montagem Littrow) foi usado como feixe sonda. Descreveremos como obter os espectros de absorção dos átomos na AMO, bem como a análise destes. A forma desses espectros dependem da intensidade e frequência dos feixes que criam a Armadilha e podem apresentar regiões de ganho de 15% para determinados valores de

intensidade. Ainda com estes espectros, podemos inferir a respeito da densidade atômica da AMO. Discutiremos ainda a possibilidade de produção de átomos de Rydberg frios neste tipo de Armadilha.

Apoio Financeiro: FINEP, FACEPE, CNPq e CAPES.

Absolute Density Measurements of Ti, Ti⁺ and Ar(³P₂) in a D.C. Argon Glow Discharge
SCHEID¹, V. H. B.; RUSBUELDT, D.; SCHWEER, B.; HINTZ, E.

Institut fuer Plasmaphysik, Forschungszentrum Juelich GmbH, Association EURATOM/KFA, P.O. Box 1913, D)5170 Juelich, Fed. Rep. Germany

The laser induced fluorescence (LIF) is an active spectroscopic technique which has been successful used to make selective, nondisturbing and local measurements of particle densities in glow discharges. However, it is necessary to calibrate the LIF-signal if absolute densities are desired. Several methods have been employed for this purpose. In this work a calibration method using a carbon arc as a radiation standard is described. Results for densities of titanium atoms, ions and the ³P₂ metastable argon atoms are given. The measurements were made in a d.c. argon glow discharge with a titanium cathode operated in the abnormal range. A titanium density of about $3.0 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ has been found.

(1) on leave from Instituto de Estudos Avançados, CTA.

12231-970 S. J. dos Campos, SP, Brazil.

Geração de Pulsos de Picosegundos na Região 570-600 nm por um Oscilador em Anel de Fibra de Sílica Pura Bombeado em 1,319 μm.

VERMELHO, M. V. D.; HICKMANN, J. M.; GOUVEIA, E. J. T. DE A.; GOUVEIA-NETO, A. DA S.

UFAL

Nós apresentamos uma fonte de pulsos de picosegundos, totalmente de estado sólido, operando na região espectral de 570-600 nm, a partir do bombeamento síncrono de uma fibra de Sílica pura num oscilador em anel, por um laser Nd:YAG "Q-switched/Modelocked" operando em 1,319 μm. Com esta configuração obtivemos um aumento por um fator de quatro na potência de pico do sinal visível gerado e uma diminuição na potência de limiar, em relação à configuração de passagem única. O sinal visível é gerado por um processo de mistura não linear de alta ordem, envolvendo pulsos Stokes do espalhamento Raman estimulado e os pulsos do sinal fundamental. O sistema proposto pode ter seu tamanho reduzido, uma vez que se use um laser de Nd:YAG bombeado por diodo como fonte de excitação.

POLÍMEROS

Crescimento de Polímeros Condutores (POL) - 08/06/94

Layer-by-Layer Molecular Self-Assembly of Conducting Polymer Heterostructures

RUBNER, M. F.

Department of Materials Science and Engineering

Massachusetts Institute of Technology Cambridge, MA 02139

Recent advances in the molecular-level processing of conducting polymers have made it possible to fabricate thin film multilayer heterostructures with an unprecedented level of control over the type, sequence and thickness of the deposited layers. The basis for this new processing scheme is the alternate deposition of monolayers of positively and negatively charged polymers. In this presentation, we will describe the fabrication and electrical and optical properties of a number of new polymer based thin film heterostructures including highly anisotropic electrically conductive multilayers based on polypyrrole and polyaniline, thin film electroluminescence devices based on self-assembled films of poly(p-phenylene vinylene) and multilayer heterojunctions based on conjugated polymers and sulfonated fullerenes ("Bucky Balls"). The ability to self-assemble multilayer thin films of conjugated polymers is expected to offer new possibilities in the creation of thin film devices based on conjugated polymers such as multilayer light emitting diodes and high capacity thin film dielectrics.

PREPARAÇÃO QUÍMICA E ELETROQUÍMICA DE POLÍMEROS CONDUTORES

DE-PAOLI, M. A.

Instituto de Química, UNICAMP

Polímeros condutores são materiais projetados para unir as propriedades de processabilidade, baixa densidade e baixo custo de produção dos polímeros usuais com a condutividade eletrônica e as propriedades de semicondutores dos sólidos inorgânicos tradicionais. Nas duas últimas décadas tem sido feito um grande esforço para concretizar esta união desenvolvendo e refinando os seus métodos de síntese e de dopagem. Os principais materiais estudados, polipirrol, politiofeno, polianilina e seus derivados, podem ser preparados por oxidação química ou eletroquímica dos respectivos monômeros em diferentes meios e na presença de diversos dopantes. Escolhe-se o método mais adequado em função das propriedades a serem estudadas e das aplicações visadas. O método eletroquímico é apropriado para obtenção de filmes para dispositivos eletrocromáticos, fotoeletroquímicos e fotogalvânicos. O método químico é usado para a obtenção de materiais em larga escala para serem usados como componentes de blindagens poliméricas que podem ser usadas como blindagem contra interferência eletromagnética, dissipação de eletricidade estática ou revestimento condutor. Serão discutidas as sínteses eletroquímicas do polipirrol em presença de surfactantes aniónicos, do poli(3-metil-tiofeno) e da polianilina, e as suas aplicações em dispositivos eletrocromáticos e fotoeletroquímicos. O comportamento eletroquímico, morfologia, condutividade e resposta óptica dos filmes poliméricos assim obtidos dependem de: contra-íon, temperatura de síntese, densidade de corrente e densidade de carga utilizadas. A condutividade e a resposta eletroquímica da polianilina e da poli(o-anisidina), obtidas por oxidação com $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ em meio aquoso ácido dependem de: ácido usado e sua concentração, presença de catalisador, co-catalisador e força iônica do meio.

FILMES LANGMUIR-BLODGETT DE LIGNINAS EXTRAÍDAS DE PINUS CARIBAEA HONDURENSIS

CONSTANTINO, C. J. L.; JULIANI, L. P.; BALOGH,
D. T.; CURVELLO, A. A. S.; OLIVEIRA JR, O. N.
USP - IFQSC

Filmes Langmuir-Blodgett (LB) foram depositados a

partir de monocamadas de ligninas, extraídas de *Pinus Caribaea Hondurensis* por dissolução em acetona. As condições ideais para deposição dos filmes foram determinadas através de estudos de pressão de superfície e estabilidade dos filmes de Langmuir (monocamadas sobre a superfície da água) de ligninas. As monocamadas foram obtidas de soluções de lignina em tetra hidrofurano (THF), na concentração de 1mg/ml, com uma

velocidade de compressão das barreiras de 8mm/min. Tais monocamadas atingiam estabilidade após cerca de 15min. Os filmes LB foram depositados a uma pressão de 19mN/m, em substratos de vidro polido ou vidro recoberto com um filme de alumínio evaporado. Deposições ocorrem somente nas retiradas dos substratos, com taxas de transferência próximas de 1, formando filmes LB do tipo Z. A velocidade de imersão do substrato foi de 3mm/min. O potencial de superfície dos filmes LB é de cerca de 150mV, praticamente independente do número de camadas. Medidas preliminares de espessura indicam que cada camada tem espessura de aproximadamente 20Å.

DIFUSIVIDADE TÉRMICA DO ACETILENO POLIMERIZADO A PLASMA

NERY, S. M. D.; MOTA, R. P.; ALGATTI, M. A.

UNESP/FE-DFQ

LEITE, N. F.

LAS/INPE

Polímeros obtidos por deposição a plasma apresentam algumas características diferentes das dos convencionais (obtidos por métodos químicos), tais como: são essencialmente livres de "pinholes", inertes a ácidos e bases fortes e apresentam boa aderência a diversos tipos de substratos.

Filmes finos poliméricos são depositados a partir de excitações por descargas contínuas e/ou alternadas em gases e/ou vapores orgânicos. O reator utilizado para a obtenção das amostras estudadas neste trabalho é constituído de eletrodos de placas paralelas, mantidos à vácuo numa câmara de vidro pyrex, excitados por rádio frequência. Usou-se uma pressão de 0,2 mbarr de acetileno na câmara e a frequência da fonte foi fixada em 30 MHz.

Os filmes depositados apresentaram espessuras entre 0,5 e 4,0 μm medidas por microscopia interferométrica em substratos de vidro. O estudo da estrutura molecular destes polímeros, por espectroscopia infravermelha em substrato de KBr, revelou forte absorção carbonohidrogênio em 1440 e 1380 cm^{-1} .

Foi empregado um método fototérmico, utilizando-se uma célula fotoacústica aberta para medir a difusividade térmica destes polímeros depositados sobre folha de alumínio de 60 μm . A difusividade térmica foi medida para filmes de espessuras entre 0,4 e 4,0 μm , sujeitos a diferentes campos de polarização.

Modelos Estatísticos para a Condutividade e Estabilidade (POL, EST) - 08/06/94

CONDUÇÃO INTERMOLECULAR EM POLIANILINA E POLI(O-METOXIANILINA)

LEPIENSKI, C. M.

Laboratório de Materiais - Departamento de Física - UFPR

FERREIRA, G. F. L.; FARIA, R.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Os mecanismos de condução intramolecular desenvolvidos para polímeros conjugados são representados pelo modelo SSH e suas variações, e encontram boa concordância com resultados experimentais. Entretanto, o cálculo mais aprimorado da condutividade de uma amostra qualquer, dopada ou não dopada, esbarra na dificuldade de se estabelecer um modelo mais realista que leve em conta mecanismos de condução intermoleculares. Nesse trabalho aplicamos o modelo de "hopping" dentro da aproximação "continuous time random walk" (CTRW), desenvolvido para sólidos desordenados. Utilizando uma distribuição aleatória de tempos de espera de saltos esse modelo gera uma curva típica de condutividade vs. frequência. Ajustamos esse modelo para medidas realizadas com polianilina e poli(o-metoxianilina) na faixa de frequências entre 10^{-2} Hz e 10^5 Hz. O modelo estabelece uma distribuição de tempos de espera para os saltos, interpretados como responsáveis pela condução intermolecular.

MEDIDAS DA CONDUTIVIDADE COMO FUNÇÃO DA TEMPERATURA PARA AMOSTRAS DE POLIPIRROL DOPADO

SANTOS, F. L. DOS; MELO, C. P. DE

Departamento de Física - UFPE

O modelo mais freqüentemente usado para a interpretação de resultados da condutividade macroscópica de amostras de polímeros condutores é o de "hopping" de alcance variável, desenvolvido principalmente por

Mott e seus colaboradores. Este modelo relaciona a condutividade de um material com a temperatura e a dimensionalidade do processo microscópico de transferência de carga. Com o objetivo de estudar o comportamento da condutividade como função da temperatura para o polipirrol dopado (com ácido p-tolueno sulfônico), realizamos medidas em amostras desse material por nós mesmo sintetizadas. Os nossos resultados experimentais, porém, não se ajustaram bem ao comportamento predito pelo modelo Mott. Análise realizada em resultados publicados por outros autores também nos revelou o mesmo desvio no comportamento, principalmente para amostras na mesma faixa de condutividade das nossas, o que nos levou a introduzir uma nova relação matemática alternativa que descreve melhor a dependência da condutividade com a temperatura para essas amostras. Outras possibilidades foram investigadas como a existência de transições de dimensionalidade para a faixa de temperatura variada (50 K - 300 K) e a eventual natureza fractal para a estrutura morfológica do polipirrol (à qual estaria associada uma dimensionalidade não inteira). A principal conclusão de nosso trabalho é a de que os vários resultados da literatura para o comportamento da condutividade de amostras de polímeros condutores com a temperatura necessitam de um mais rigoroso tratamento estatístico dos resultados.

UM MODELO TEÓRICO PARA A CONDUTIVIDADE ESPECÍFICA DO PERCLORATO DE LÍCIO COMPLEXADO NO DIESTERATO DE POLI(ETILENO GLICOL-400)

OLIVEIRA, A. L. DE; DAMASCENO, O. DE O.; SILVA, P. R. DA; FARIA, J. G. P. DE; VIANA, N. B.

Dep. de Física, ICEx, UFMG, Caixa Postal 702, C.E.P. 30161-970, Belo Horizonte, M.G., Brasil

SANGIORGE, C. L.

Dep. de Química, CEFET, Av. Amazonas 5253, C.E.P. 30180-001, Belo Horizonte, M.G., Brasil

SILVA, A. L.

D. de Química, ICEx, UFMG, Caixa Postal 702, C.E.P. 30161-970, Belo Horizonte, M.G., Brasil

DONOSO, J. P.; BONAGAMBA, T. J.

Instituto de Física e Química de São Paulo, C.E.P. 13.560-970, São Carlos, S.P., Brasil

Medidas realizadas utilizando-se Espectroscopia de Impedâncias e Ressonância Magnética Nuclear no estudo do Perclorato de Lítio complexado no Diesterato de Poli(Etileno Glicol-400), a diferentes temperaturas e concentrações, permitiram-nos propor um modelo original de transição ordem-desordem que se mostra consistente com as seguintes características de nossos dados: i) a dependência da condutividade com a concentração, mantendo-se a temperatura constante, apresenta picos agudos em $n = n^* = 9$ ($n = O/Li$), onde n^* seria

uma concentração crítica; ii) os picos agudos, que se apresentam nos gráficos das condutividades em função das concentrações, para uma mesma concentração e aumentando-se a temperatura, não sofrem deslocamentos sensíveis, continuando a ocorrer em $n = n^* = 9$, mas se tornam mais altos; iii) linhas de Ressonância Magnética Nuclear apresentam padrões característicos de interações quadrupolares spin-rede em concentrações $n < n^*$. Tais padrões não se manifestam em concentrações $n = n^*$ ou $n > n^*$; iv) existem alargamentos significativos nas linhas de ressonância spin-rede em concentrações $n < n^*$. O modelo original por nós proposto inclui ambos os aspectos característicos dos resultados obtidos: dependência crítica com a concentração e do tipo Arrhenius com a temperatura.

CADEIAS POLIMÉRICAS IDEAIS

ROSA JUNIOR, E.

UFPR

Recentemente foi proposto por Altenberger e Dahler [*J.Chem.Phys.*92(1990)3100] um novo enfoque para o tratamento de deformações de elastômeros, onde foi feito uso da mecânica estatística para analisar as propriedades do conhecido modelo massa-mola para cadeias poliméricas ideais sem interações entre elas. A deformação de uma cadeia polimérica ideal é tratada aqui com a introdução de várias medidas da resposta da cadeia a esforços tanto no regime elástico quanto no inelástico. Vários modelos são utilizados para o potencial de interação entre massas vizinhas e os resultados mostram uma grande variedade de comportamentos dependentes da escolha do tipo de potencial.

Analytical Results for Renormalization and Memory of Anharmonic Lattices at the Onset of Fractures

OLIVEIRA, F.

ICCMP - UnB

Renormalization of anharmonic lattices is still an unsolved problem within many branches of physics. We study both by simulations and by analytical methods the scaling properties of anharmonic lattices. At the onset of fracture we map this lattice into a *transformed lattice with disorder*, which is easily renormalized. This is a particular solution which is important for fractures and may be useful in another areas of physics. By studying the properties of the transformed lattice, we obtain analytical results for dynamical scaling of the lattice motion. From these we obtain the *transformed memory* of the lattice. We discuss how the memory affects the time for a fracture to occur. These results may be used to interpret simulations and experiments.

Transições de Fase em Material Polimérico (POL, EST) - 09/06/94

NEW CRYSTALLINE CARBON NETWORKS WITH UNUSUAL PROPERTIES

BAUGHMAN, R. H.

AlliedSignal Inc., Research and Technology, Morristown, New Jersey 07962-1021 USA

GALVAO, D. S.

Instituto de Física, UNICAMP, CP 6165 CEP 13081 Campinas - SP - Brazil

Most materials shrink laterally and become less dense when stretched. Materials that both expand laterally (that is, have negative Poisson's ratio) and densify when stretched are of interest both from academical and technological point of view. A few monocrystalline phases with negative Poisson's ratio are known, but these do not densify when stretched. Here we propose some hypothetical phases of carbon which exhibit both kinds of behavior. Other unusual properties of these phases include negative thermal expansion, dopant-controlled porosity and low-temperature polymorphism. We named these phases twisted-chain auxetics, because phases with a negative Poisson's ratio are called auxetics and because the auxetic property is a result of a completely new concept based on the shear deformation that results from untwisting the helical chains [1,2]. Crystal structure and properties were calculated by molecular mechanics and molecular dynamics using the POLYGRAF program and an empirical force field, which includes van der Waals, bond stretch, bond angle bend and torsional rotation terms. Predicted volumetric expansion coefficients are about an order of magnitude more negative than has been observed for other materials having volumetric thermal expansion coefficients that are negative above ambient temperature. We also discuss the possibility of designing new materials presenting specific thermal and electronic properties, as for instance, strong fluorescence [3].

[1] R.H. Baughman and D.S. Galvao, *Nature* 365, 735 (1993).

[2] J.S. Moore, *Nature*, 365, 690 (1993).

[3] Z.G. Soos, S. Ramasesha and D.S. Galvao, *Phys. Rev. Lett.* 71, 1609 (1993).

CORRENTE ELÉTRICA ESPONTÂNEA EM COPOLÍMERO P(VDF/TrFE).

GUIMARÃES NETO, J. M.

Depto. de Física/CCN - Universidade Federal do Piauí -

Teresina Pi

FARIA, R. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos/DFCM - USP

Uma corrente elétrica espontânea em medidas feitas em amostras de copolímero 60:40 de P(VDF/TrFE) curto-circuitadas, foi detectada acima de 80°C. A essa temperatura esse copolímero sofre uma transição de fase estrutural ferro-paraelétrica, associada à uma mudança conformacional de trans-planar para *TGTG'*. O sinal dessa corrente se inverteu ao trocar as posições dos eletrodos no circuito de medida. medidas feitas com eletrômetro de impedância elevada mostrou que nessa temperatura surge, também, o aparecimento de uma tensão espontânea. A influência do material empregado como eletrodo sobre a corrente (ou tensão) espontânea foi cuidadosamente estudada, usando-se combinações dos seguintes metais: ouro, alumínio, cobre e níquel. É importante frisar que a resistividade do material decai muito na fase paraelétrica. Se uma diferença de potencial é gerada nas interfaces eletrodo-polímero, a corrente que surge a 80°C pode ter origem na variação da resistividade do material.

COMPORTAMENTO TÉRMICO E PIROELÉTRICO DOS COPOLÍMEROS P(VDF-TrFE)

MOREIRA, R. L.; RIGHI, A.; LOBO, R. P. S. M.

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

Os copolímeros P(VDF-TrFE) são ferroelétricos a temperatura ambiente e apresentam atividades piezoelétricas e piroelétricas comparáveis àquela do PVDF β . Além disso, para composições molares de TrFE indo de 18% a 48%, estes materiais sofrem uma transição de fase de primeira ordem para uma fase paraelétrica de alta temperatura. Neste trabalho, técnicas calorimétricas (DSC) e piroelétricas (TSDC) foram utilizadas para investigar as transições de fase ferroelétricas destes copolímeros, para amostras com 25%, 30% e 40% por mol de TrFE. Devido ao caráter difuso das transições, técnicas específicas para descrever transições de fase difusas em ferroelétricos desordenados foram utilizadas para dar uma descrição fenomenológica de nossos sistemas. Nós pudemos obter, para cada composição, as funções de distribuição de temperaturas

críticas e a dependência térmica dos coeficientes piezoelétricos e das polarizações espontâneas dos materiais.

Financiamento: FAPEMIG, CNPq e FINEP.

**EFEITOS DOS PROCESSOS DE
PREPARAÇÃO, CRISTALIZAÇÃO E
DOPAGEM SOBRE A ESTRUTURA DOS
COPOLÍMEROS P(VDF-TrFE).**

ALVES, N.

*Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente
Prudente - UNESP*

GIACOMETTI, J. A.; OLIVEIRA JR, O. N.; KONDO,
A. A.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Os copolímeros de polivinilideno fluorado com triluoretileno - P(VDF-TrFE), são ferroelétricos, apresentando atividade piezoelétrica comparável às das cerâmicas, sendo então alvo de grande interesse científico. Devido a sua natureza polar o material apresenta polarizabilidade de segunda ordem e portanto propriedades de ótica não linear. Este fato é de grande interesse por possibilitar a construção de dispositivos para ótica não linear, como por exemplo os comutadores óticos. Neste aspecto, tem sido também de grande interesse os filmes de polímeros, polar ou não, dopados com corantes orgânicos. Neste trabalho é apresentado um estudo do efeito dos processos de preparação, tratamento térmico e dopagem com corantes sobre a estrutura do P(VDF-TrFE), nas composições molares 60/40, 70/30 e 80/20 através de medidas de DSC, IR e RX. Medidas de DSC mostram duas transições que podem ser devido a existência de duas fases ferroelétricas. Apresentamos uma discussão sobre a possível coexistência destas fases à temperatura ambiente. Outra interpretação que tem sido dada para estes dois picos nas medidas de DSC, é fundamentada na formação de domínios de uma única fase ferroelétrica com diferentes tamanhos. Assim domínios pequenos produziram o pico a temperaturas mais baixas e domínios grandes o pico a temperaturas altas. Nossos resultados indicam que as duas interpretações são equivalentes. Constatamos ainda que as amostras preparadas por solução em solvente, como a acetona, apresentam estrutura diferente das preparadas por prensagem a quente, e que a adição de corantes como a Rodamina 560 e o DODCI não produzem grandes alterações estruturais.

**DECOMPOSIÇÃO ESPINODAL NO GEL
TERMOSENSÍVEL DE
POLI(N-ISOPROPILACRILAMIDA)**

SOUZA, R. G. DE; FREITAS, R. F. DE S.

D. Eng. Química - UFMG

LICINIO, P.

*Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo
Horizonte - MG*

O gel IPAA é hidrossolúvel, apresentando uma forte expansão volumétrica (40x) quando a temperatura cai abaixo de 35°C. Esta é uma transição de fase de 1ª ordem com temperatura crítica inferior. Na energia livre deste sistema de 2 componentes, interveem além da energia de interação direta e da entropia usuais, um termo elástico que impede a existência de fases muito diluídas. A propriedade de expansão termo-sensível tem sido explorada na filtragem seletiva e na concentração de macromoléculas. Relatamos aqui um levantamento da curva espinodal, associada à transição de fase neste gel. Utilizamos a técnica de espalhamento estático de luz, que é sensível às flutuações nos estados de concentrações metaestáveis, que caracterizam a espinodal.

**CONDUTIVIDADE INDUZIDA POR
RADIÇÃO-X NAS FASES FERRO E
PARAELÉTRICA DO COPOLÍMERO
P(VDF/TrFE).**

CUNHA, H. N. DA

Depto. de Física/CCN - UFPI - Teresina Pi

FARIA, R. M.

IFQSC/DFCM - USP

A evolução da condutividade induzida por radiação ionizante (RIC) com a dose absorvida em materiais poliméricos depende, principalmente, sobre a cinética de três fenômenos: geração de portadores, mecanismos de recombinação e equilíbrio entre aprisionamento e liberação de cargas das armadilhas do material. Estes fenômenos podem estar relacionados à estrutura química e morfologia do material. Medidas do RIC variando alguns parâmetros físicos foram realizadas no copolímero P(VDF/TrFE) nas composições 60/40 e 70/30 mol% em suas fases ferro e paraelétrica. Foi observado que o comportamento da RIC é bem diferente nas duas fases e que alguns parâmetros alteram sensivelmente a condutividade elétrica. Medidas auxiliares tipo DSC, difração de RX, espectroscopia IR, EPR, coeficiente piezoelétrico (d_{31}) e peso molecular foram realizadas e seus resultados evidenciam criação de radicais livres, fenômenos de degradação e reticulação, alteração de cristalinidade, etc. Um modelo teórico baseado na condução por transporte dispersivo está sendo estudado para explicar a condutividade neste material.

Polímeros como Dispositivos Óticos
(POL, OTI) - 09/06/94

POLÍMEROS PARA ÓTICA NÃO LINEAR - EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM

GIACOMETTI, J. A.

Universidade de São Paulo

A síntese de novos materiais poliméricos abriu a possibilidade de usá-los em aplicações específicas como em dispositivos para ótica não linear. Nesta apresentação será discutida a situação atual de pesquisas científicas de polímeros com propriedades óticas de segunda ordem. Serão discutidos: a) as vantagens e desvantagens em comparação com materiais cristalinos; b) tipos de polímeros utilizados (polímeros amorfos dopados com moléculas polares, polímeros com moléculas na cadeia principal, polímeros com moléculas pendentes à cadeia principal e polímeros com ligações cruzadas); c) importância do processo de orientação dipolar para se obter um sistema não centro simétrico; d) estabilidade térmica e perfil da polarização elétrica induzida nos filmes; e) comparação dos coeficientes eletro-óticos e das suscetibilidades de segunda ordem χ^2 de diversos polímeros e cristais orgânicos e inorgânicos; e f) possibilidades de aplicações em dispositivos. Para finalizar será feito um breve resumo das atividades em andamento no DFCM - IFQSC - USP.

DETERMINATION OF LINEAR AND NONLINEAR POLARIZABILITIES OF LARGE π -CONJUGATED SYSTEMS AT THE *AB INITIO* LEVEL OF THEORY

TOTO, J. L.; TOTO, T. T.; MELO, C. P. DE

Departamento de Física - UFPE

Axial components of the polarizability, hyperpolarizability and second order hyperpolarizability of retinal model molecules are calculated using *ab initio* coupled-perturbed Hartree-Fock (CPHF) theory. Conformational rearrangements are shown to effect some components in a systematic fashion. We then present preliminary results for the formulation of an oligomer method capable of determining accurate longitudinal nonlinear optical properties of π -conjugated systems. This is accomplished, in part, by finding the static longitudinal second-order hyperpolarizabilities, γ_{zzzz} , of polyacetylene and polypyrrole oligomers through 44 and 45 heavy atoms, respectively. The important effects due to electron correlation are then studied using second order Moller-Plesset perturbation theory. This will include a discussion of our newly developed finite-field recipe for deriving the above γ_{zzzz} values with the use of the popular black-box electronic structure programs such as Gaussian and GAMESS. Lastly, we investigate the effects of non-resonant frequency dispersion on γ_{zzzz} of polyacetylene using time-dependent CPHF theory.

Aplicações Tecnológicas (POL) -
09/06/94

**O EFEITO DA DOSE DE RADIAÇÃO
ELETRÔNICA ABSORVIDA NA EMISSÃO
SECUNDÁRIA**

CHINAGLIA, D. L.; FERREIRA, G. F. L.

USP - IFQSC

HESEL, R.

UNESP - Rio Claro

Consideráveis deslocamentos (centenas de eV) são observados no valor da energia associada ao segundo ponto de cruzamento da curva de emissão em amostras de Teflon FEP e Mylar PET, quando submetidas à irradiação eletrônica de baixa energia (0,4 - 2 keV). As doses de

radiação absorvidas são da ordem de 10^9 rad. O interessante nessas medidas é que, para o Teflon FEP, o segundo ponto de cruzamento desloca-se para energias menores com o aumento da dose de irradiação absorvida, ao passo que para o Mylar PET o deslocamento ocorre para energias maiores. Medidas cuidadosas revelam ser este um efeito superficial intrínscico, não decorrente do método experimental empregado. Os resultados foram obtidos através da análise da corrente secundária nas regiões acima e abaixo do segundo ponto de cruzamento.

ESTUDO DA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DA POLIURETANA (PU) E COMPÓSITOS PU/PZT

NAGASHIMA, H. N.

UNESP-Campus de I. Solteira - Grupo de Polímeros

SAKAMOTO, W. K.; KANDA, D. H. F.

UNESP-Campus de I. Solteira-Grupo de Polímeros

As poliuretanas são estudadas na engenharia biomédica por apresentarem propriedades mecânicas adequadas e por serem materiais biocompatíveis. Neste trabalho, estamos estudando o comportamento da condutividade elétrica da poliuretana, derivada do óleo de mamona, e do composto PU/PZT quando dopados com HCL. Amostras de poliuretanas mergulhadas no ácido clorídrico por cinco dias apresentaram um aumento da condutividade de cinco ordens de grandeza. Foram realizadas medidas isotérmicas para verificar a estabilidade da condutividade para amostras com tempos diferentes de dopagem. Compósitos de PU/PZT, obtidos na forma de filmes finos, apresentaram um aumento da sua condutividade elétrica, após vinte horas de dopagem com HCL, de sete ordens de grandeza. Estes materiais poderão ser utilizados como materiais biomédicos se possuírem uma determinada condutividade permitindo que pequenos sinais elétricos possam estimular a liberação de unidades de droga previamente colocadas na estrutura polimérica.

Apoio: Fundação Banco do Brasil - F.B.B.

Fundação para o desenvolvimento da UNESP - FUN-DUNESP

ESTUDO DA ENERGIA DE ATIVAÇÃO EM FILMES DE PPS DOPADOS COM PHTALOCIANINA DE COBRE

CAVALCANTE, E. M.; SAKAMOTO, W. K.;

NAGASHIMA, H. N.

UNESP - CAMPUS ILHA SOLTEIRA - Grupo de Polímeros

CAMPOS, M. S. DE

IFQSC - USP

Recentes estudos em polímeros condutores tem mostrado que o poli(sulfeto de p - fenileno) - PPS apresenta propriedades que permitem vislumbrar sua aplicação. Nosso interesse é utilizar o polímero condutor como biomaterial. Neste sentido estamos caracterizando o PPS dopado com phtalocianina de cobre. Amostras estão sendo obtidas na forma de filmes finos pela fusão do PPS em pó, em espessuras que variam de 15 a 100 micra. Resultados preliminares mostram que a condutividade cresce para pequenas concentrações do dopante até um valor em torno de 20% em peso, reduzindo para concentrações maiores. Medidas da condutividade em função da temperatura, também, estão sendo realizadas com intuito de verificar a dependência da energia de ativação com a concentração do dopante.

Apoio: Fundação Banco do Brasil - F.B.B.

Fundação para o desenvolvimento da UNESP - FUN-DUNESP

COMPÓSITO FERROELÉTRICO E SUA APLICAÇÃO EM TENSIOMETRO

SAKAMOTO, W. K.; TSUNODA, E. S.

UNESP - CAMPUS ILHA SOLTEIRA - Grupo de Polímeros

OKI, N.

UNESP - CAMPUS ILHA SOLTEIRA - Depto. Eng.

Elétrica

LONGO, E.

UFSCAR

Tensiómetro consiste em uma cápsula de cerâmica porosa, cheia de água, que é enterrada no solo e que fica ligada a um manômetro. O manômetro de mercúrio registra a variação de pressão hidrostática no interior da cápsula e a interpretação dos resultados permite determinar a umidade do solo.

Neste trabalho propomos a substituição do manômetro de mercúrio por um sensor que utiliza a propriedade piezoelétrica do material. Compósitos polímero-cerâmica ferroelétrica, em particular a poliuretana vegetal (PU) e o titanato niobato zirconato de chumbo (PZTN), estão sendo caracterizados em função do tempo de polarização, da temperatura de polarização e da porcentagem de cerâmica inserida na matriz polimérica. O composto, na forma de filme, é interposto como diafragma entre duas células ligadas ao tensiómetro. O sinal elétrico devido a variação da pressão hidrostática é observado num osciloscópio. Resultados preliminares mostram que compósitos na proporção 1:1 apresentam sensibilidade suficiente para serem utilizados como sensores.

Apoio: Fundação Banco do Brasil - F.B.B.

Fundação para o desenvolvimento da UNESP - FUN-DUNESP

PIROELETRICIDADE EM COMPÓSITO PU/PZT

SAKAMOTO, W. K.; NAGASHIMA, H. N.

UNESP - CAMPUS ILHA SOLTEIRA - Grupo de Polímeros

Uma das aplicações do efeito piroelétrico é, sem dúvida, o sensor de radiação de infravermelho. A preocupação atual com os alarmes tem contribuído para que vários pesquisadores procurem obter um material com alta atividade piroelétrica, de fácil manuseio e mecanicamente resistente.

Neste contexto propomos o estudo da propriedade piroelétrica de composto Polímero - Cerâmica Ferroelétrica, particularmente, a Poliuretana Vegetal (PU) e o Titanato Zirconato de Chumbo (PZT) ou o Titanato Niobato Zirconato de Chumbo (PZTN). Medidas de Corrente de Despolarização Termo Estimulada

(TSDC) permitem determinar o coeficiente piroelétrico (p) da amostra através da expressão:

$$p(T) = \frac{1}{A} \cdot \frac{I_p}{\frac{dT}{dt}}$$

Resultados preliminares mostram que o compósito PU/PZT na proporção 1:1 apresenta um coeficiente piroelétrico em torno de $9 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2\text{K}$, enquanto para o PZT $p = 5 \times 10^{-4} \text{ C/m}^2\text{K}$ e para o PVDF $p = 9 \times 10^{-6} \text{ C/m}^2\text{K}$ na temperatura de 343 K.

Apoio: Fundação Banco do Brasil - F.B.B.

Fundação para o desenvolvimento da UNESP - FUNDUNESP

CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DE SOLO-POLÍMERO PARA USO EM CONSTRUÇÃO CIVIL

PEREIRA, A. O.; SAKAMOTO, W. K.; SILVA, S. M.
UNESP - CAMPUS ILHA SOLTEIRA
CHIERICE, G. O.
IFQSC - USP

A busca de materiais alternativos que possibilitem a redução de custos, viabilizem a construção de edificações e/ou apresentem melhores propriedades que os tradicionais, tem sido objeto de estudo de vários pesquisadores. Mistura de concreto-polímero tem apresentado maior resistência a compressão axial, a tração e a abrasão, além de uma redução na permeabilidade com relação à água.

Objetiva-se estudar, neste trabalho, a mistura solo-polímero buscando propor um novo material para construção de habitações de interesse social. Ensaio de resistência a compressão axial tem mostrado que o material, na forma de placas, pode ser usado como elemento construtivo, enquanto estudos de permeabilidade indicam que o polímero agrega o solo diminuindo a porosidade do sistema. Outro resultado importante diz respeito a densidade do material. Amostras com 12% de polímero apresentaram densidade de $1,5 \text{ g/cm}^3$, quando misturas usuais de solo-cimento apresentam densidade igual a $2,0 \text{ g/cm}^3$.

Apoio: Fundação Banco do Brasil - F.B.B. e CNPq

Junção PN de poli(o-metoxianilina) e carboximetilcelulose

ONMORI, R. K.
LME-Escola Politécnica da USP
CAMPANA FILHO, P. S.
DFQ-IFQSC, USP

MATTOSO, L. H. C.; FARIA, R. M.
DFCM-IFQSC-USP

Uma solução aquosa ácida do poliácido carboximetilcelulose (CMC) foi depositada sobre um filme de poli(o-metoxianilina) (POMA), não-dopado, e por evaporação

do solvente houve adesão dos dois filmes poliméricos. Os prótons do poliácido ao se difundirem pela interface dos dois polímeros causa a dopagem da POMA, resultando assim na formação de uma junção tipo PN. Essa junção foi caracterizada por um HP 4145B Semiconductor Data Analyser, e pela curva característica IxV foi verificada a presença de uma barreira de potencial devido a existência de um processo de retificação. A tensão limiar da junção foi de 3,5 V e a 8 V a corrente foi de 30 nA. Na tensão reversa de - 8 V observou-se uma pequena fuga de 1,4 nA.

Correntes de Despolarização Termicamente Estimuladas (CDTE) em Polietileno de Baixa Densidade (PEBD) Contendo Aditivo Anti-estático

PARRA, R.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo e
Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo
BLAK, A. R.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O controle da qualidade de materiais anti-estáticos é importante para diversos setores da tecnologia, em particular no setor de embalagens para produtos eletrônicos, para produtos explosivos e empacotamento de pós e grãos. Neste trabalho procura-se caracterizar o PEBD contendo diferentes concentrações (2%, 5%, 10% e 20%) de Lincamid Alkom 1290, um aditivo anti-estático, utilizando a técnica de CDTE. Este polímero foi escolhido por ser o material mais empregado na indústria de embalagem com as finalidades acima. A espectroscopia óptica, nas regiões do infra-vermelho, visível e ultra-violeta, não permite a distinção entre essas concentrações do aditivo neste material. Foram realizadas medidas na faixa de 80K a 350K, com taxa de aquecimento de $0,1 \text{ K.s}^{-1}$. O polímero, apesar de fragilizado com a baixa temperatura, não trincou com a pressão das garras de suporte. O limite superior de temperatura ficou suficientemente inferior ao ponto de fusão do PEBD ($120^\circ\text{C} - 135^\circ\text{C}$). O comportamento do aditivo difundido no polietileno ao sofrer estas variações de temperatura não foi verificado. Nos espectros de CDTE, foram encontradas bandas em 230K e 285K, de altura crescente com a intensidade do campo aplicado. A banda de 230K exibiu uma forte dependência com a concentração do aditivo na amostra. Percebeu-se que os ciclos térmicos de resfriamento a 77K, temperatura de nitrogênio líquido, e aquecimento até 350K, exigido pelo método, degrada a amostra de alguma forma pois as alturas das bandas diminuem quando a medida é repetida em um mesmo corpo-de-prova.

DETERMINAÇÃO DO PARÂMETRO DE SOLUBILIDADE DO POLI(ETILENO) CLOROSSULFONADO

ANDRADE, L. A.; AMARAL, L. Q.; SANTOS, R. T.
Instituto de Física - USP

AKCELRUD, L.

Escola de Química - Universidade Federal do Rio de Janeiro

O poli(etileno) clorossulfonado - Hypalon® - é um elastômero de engenharia, sendo seu principal uso a manufatura de cabos elétricos onde sofre reticulação com o uso de feixe de elétrons. A reticulação é importante para o desempenho físico dos cabos. A densidade de ligações cruzadas pode ser determinada a partir do conhecimento do parâmetro de solubilidade do polímero. Utilizamos para determinação do parâmetro de solubilidade o método de estimativa de Fedors¹ baseado na predição da energia coesiva por meio das funções aditivas, o método de equilíbrio de inchamento de Gee² e o método de turbidimetria ("cloud point") utilizado por Marco et al.³. Houve uma boa concordância dos valores encontrados pelos três diferentes métodos além de ter sido possível a determinação das componentes espaciais (δ_h , δ_p e δ_d) do referido parâmetro.

1. R.F. Fedors. *Polym. Eng. Sci.*, 14 (1945) 147.

2. G. Gee. *Trans. Faraday Soc.*, 38 (1942) 269.

3. C. Marco, A. Bello, J. Fatou e J. Garza. *Makromol. Chem.*, 187 (1986) 177.

EFEITO DO TRATAMENTO TÉRMICO NA RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE PASTILHAS PRENSADAS DE POLI(3-METILTIOFENO) DOPADAS COM ClO_4^- .

PAWLICKA, A.; NASCIMENTO, O. R.; AEGERTER, M. A.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, S. Carlos, SP.

PEREIRA, E. C.; BULHÕES, L. O. S.

Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmica, Dpto de Química, Universidade Federal de São Carlos, SP.

WALMSLEY, L.

Departamento de Física, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, UNESP, Rio Claro, SP.

Poli(3-Metiltiofeno) (P3MT) dopado com ClO_4^- foi sintetizado eletroquimicamente à temperatura ambiente usando um potencial constante de 1,48 V a partir de uma solução de acetonitrila com 0,1 M de metiltiofeno e 0,1 M de LiClO_4 . O pó resultante foi prensado a 6,2 Kbar para formar pastilhas de espessura na faixa de 600 μm . Medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) foram realizadas em banda X (9,4 GHz) na faixa de temperatura de $-160^\circ\text{C} \leq T \leq 25^\circ\text{C}$,

para três tipos de tratamento térmico da amostra: recém feitas e guardadas a temperatura ambiente, guardadas em nitrogênio líquido e guardadas num freezer ($\sim -20^\circ\text{C}$). Nas duas primeiras situações, foi observada uma transição na linha de RPE entre -30°C e -50°C : a linha ficava inicialmente distorcida e depois se separava em duas, uma linha fina superposta a uma linha larga com valores de g muito próximos. Na terceira situação a transição era suprimida mas, a análise do tempo de difusão dos portadores de carga com a temperatura, obtido a partir da razão de assimetria (A/B) das linhas de RPE, mostra que existe um maior ordenamento na amostra a partir de -50°C .

Estrutura Eletrônica de Cadeias Poliméricas (POL) - 09/06/94

Modulating conductivity by charge transfer between lateral active groups in polyacetylene: a new type of molecular device

DANTAS, S. DE O.

Universidade Federal de Juiz de Fora Departamento de Física

GALVÃO, D. S.; SANTOS, M. C. DOS

Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Electronic and geometric structures of a polyacetylene oligomer laterally substituted by organic electron donor and acceptor groups are studied in the framework of semi-empirical AM1 technique. Electron transfer properties are analysed in terms of the conjugation pattern and the number of bonds between the lateral groups. The transfer reaction is simulated by the presence of an external electric field. Our results are as follows: (i) charge transfer has a non-linear dependence with the magnitude of the applied field, and non-linearities increase with the number of bonds between lateral groups; (ii) before the charge transfer reaction takes place, the conjugation pattern on the chain is drastically affected: alternation of single and double bonds can be suppressed by the perpendicular field, leading to a local metallic character of the chain. Thus, it can be concluded that a long chain regularly substituted by pairs of donor-acceptor groups could have its conductivity and electronic gap modulated by a perpendicular field, besides of switching the passage of carriers.

**PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E
ELETRÔNICAS DOS FRAGMENTOS
TRICIANO, CARBAZOL E
TRICIANOVINILCARBAZOL**

CUNHA, C.; CALDAS, M. J.
Instituto de Física da USP

A flexibilidade mecânica e características térmicas dos polímeros orgânicos torna-os atrativos para muitas aplicações, principalmente no que diz respeito a propriedades eletro-ópticas de interesse. Uma cadeia recentemente sinterizada com um grupamento lateral contendo unidades carbazol ou tricianocarbazol tem sido apresentada como um excelente material para aplicações em ótica não linear^a. A cadeia é longa (peso molecular em número aproximadamente 6.800) e, provavelmente, com dobramentos complexos. As unidades constituintes são moléculas de carbazol, mas não temos informação sobre a orientação relativa das unidades no polímero. Começamos este estudo por unidades isoladas, que nós investigamos através de técnicas semi-empíricas de estrutura eletrônica: PM3 e MNDO para a otimização da geometria e, INDO-CI para a análise espectroscópica. Os resultados para o espectro de absorção dos fragmentos são comparados aos resultados experimentais para o material, e podemos identificar algumas características espectrais.

^aK. Tamamura, A. B. Padias, H. K. Hall Jr and N. Peyghambarian, *Appl. Phys. Lett.*, 60, 1803 91 (1992)

**METAESTABILIDADE NO
CIS-POLIACETILENO.**

FRAGA, E. S.

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
CARVALHO FILHO, C. A. A. DE
Universidade Federal do Rio de Janeiro
BOYANOVSKY, D.
University of Pittsburgh

Acredita-se que o estudo do surgimento e evolução de defeitos em cadeias de polímeros lineares possa ajudar bastante na compreensão dos mecanismos de condutividade presentes em tais estruturas. A configuração *cis* do poliacetileno possui um estado metaestável (falso vácuo) e um estado estável (vácuo verdadeiro). Utilizando métodos de Teoria Quântica de Campos, desenvolvemos um formalismo de não-equilíbrio para o estudo do decaimento deste estado metaestável que se utiliza de defeitos tipo polaron. Podemos analisar a estabilidade de tais defeitos em função dos parâmetros relevantes do modelo, levando em consideração efeitos de temperatura e de número finito de elétrons. A taxa de decaimento assim obtida é uma função explícita do tempo, em oposição ao resultado proveniente da utilização de formalismos de equilíbrio. O modelo adotado para a descrição do poliacetileno foi a versão contínua do modelo de Su-Schrieffer-Hegger, sendo feitas as devidas extensões.

**ESTUDO COMPARATIVO, USANDO
MÉTODOS SEMI-EMPIRICOS
(AM1, MNDO, PM3), DAS ENERGIAS DE
EXCITAÇÃO E RELAXAÇÃO DOS
ISÔMEROS *trans*-ESTILBENO E
cis-ESTILBENO**

CAMILO JUNIOR, A.
USP - IFQSC
GALVÃO, D. S.
UNICAMP - IFGW

O PPV (poli-para(fenileno vinileno)) apresenta grande interesse devido às suas propriedades eletro-ópticas e potenciais aplicações tecnológicas, principalmente a nível de dispositivos [1], em virtude da forte fluorescência presente no PPV e em alguns de seus derivados. A utilização de métodos semi-empíricos tem demonstrado ser uma ferramenta bastante eficaz na investigação do comportamento eletrônico e da estrutura geométrica de polímeros conjugados. Neste trabalho fazemos um estudo comparativo, usando os métodos semi-empíricos AM1, MNDO e PM3, do estado fundamental, estados excitados (singleto e tripleto) e de carga (polarons e bi-polarons) para o *trans*-estilbeno e *cis*-estilbeno, considerados como unidades estruturais do PPV. Nós investigamos também a evolução da estrutura eletrônica do PPV em função do número de monômeros.

[1] - Z.G. Soos, S. Ramasesha e D.S. Galvão, *Phys. Rev. Lett.*, 71(10), 1609(1993)

**Estudo Teórico de uma molécula push-pull
derivada de tiofenos**

MARTINEZ, L. E. B.; GALVÃO, D. S.; SANTOS, M.
C. DOS
*Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade
Estadual de Campinas*

Oligômeros de tiofenos ligados nas posições 2-2' tem sido estudados extensivamente nos últimos anos. Em especial, sextiofenos puderam ser sintetizados com alto grau de pureza, em que apresentam estrutura cristalina bem definida, o que possibilitou a preparação de transistores a efeito de campo (fets) de boa qualidade. Entre as características especiais desses sistemas, determinou-se experimentalmente um comportamento anômalo da fluorescência de oligotiofenos substituídos com grupos terminais doadores e aceitadores de elétrons em função do número de anéis. Há indicações de que um mecanismo envolvendo transferência de carga intramolecular, que desaparece para oligômeros maiores. Estamos desenvolvendo cálculos de estrutura eletrônica a nível semi-empírico para caracterizar os estados excitados desses sistemas em função do número de anéis de tiofenos, para moléculas substituídas com os grupos nítro e amina. Nossos resultados preliminares mostram a

supressão da aparente transferência de elétrons a partir de um número crítico de anéis.

DETERMINAÇÃO DO PROCESSO DE POLIMERIZAÇÃO DA QUINONA CATECOL

SALAZAR, D. G. P.

Universidad Nacional de San Agustin e IFUSP

CALDAS, M. J.

IFUSP

As melaninas constituem uma classe de pigmentos biológicos, com função básica de fotoproteção e com característica de semicondutor amorfo. A composição de tais pigmentos não está ainda totalmente determinada. Nós estamos interessados no estudo da melanina vegetal, onde o monômero mais abundante é a quinona catecol ($C_6O_2H_4$ ou 1,2 quinona). Para isto, estamos fazendo estudo do crescimento desse polímero, considerando os possíveis sítios de ligação do monômero. Os cálculos foram realizados inicialmente usando o pacote semi-empírico DTMM (Desktop Molecular Modeller) obtendo-se as coordenadas dos átomos, as quais foram usadas como dados de entrada do MNDO (Modified Neglect of Diatomic Overlap) do MOPAC 6.0 (Molecular Package Quantum Chemistry). Com a otimização da geometria obtida e utilizando apenas o critério do calor de formação e da energia total, verificamos que uma cadeia composta de cinco monômeros, a tendência é o crescimento na forma de uma cadeia linear ordenada, isto é, sem ramificações e com ligações equivalentes. Entretanto, as diferenças de energia são muito pequenas e não são suficientes para garantir a ordem no polímero real.

Effect of Electron Correlation on the Static Polarizability and Second-Order Hyperpolarizability of Polyacetylene

TOTO, T. T.; TOTO, J. L.; MELO, C. P. DE

UFPE

KIRTMAN, B.

University of California, Santa Barbara

The static dipole polarizability and second hyperpolarizability are calculated for a series of polyenes using ab initio second order perturbation theory. The effect of electron correlation is shown to be important in the $C(2+2N)H(4+2N)$ oligomer series, where N ranges from 1 to 7. The values obtained through this series of molecules fail to adequately converge with polymer length, making it difficult to extrapolate to the infinite polymer limit. On the other hand, preliminary results indicate convergence with Hartree-Fock values, which in turn exhibit a much better convergence through $N = 22$ oligomers. This leads to the proposal of a scaled Hartree-Fock procedure for providing electronically correlated estimates of polarizabilities in polyacetylene.

Efeitos de Polarização de Spin em Cadeias Poliméricas"

AZEVEDO, S. A. F. DE; MELO, C. P. DE

*Departamento de Física, Universidade Federal de
Pernambuco*

Polímeros com número ímpar de elétrons por célula unitária apresentam singularidade característica na densidade de estados. Neste trabalho apresentamos resultados de uma investigação da estrutura eletrônica de cadeias poliméricas do tipo $(AB_2)_n$ através do uso da técnica da matriz transferência para a função de Green, dentro da aproximação de Hartree-Fock para o hamiltoniano de Hubbard diagonal. A característica mais notável desse sistema é o aparecimento de um estado localizado na região central da densidade de estados contendo 1/3 da densidade eletrônica total. Se a interação eletrônica intra-sítio levada em conta, abre-se um gap e o estado localizado, a depender dos valores relativos dos parâmetros, pode surgir no topo da banda de valência ou no limite inferior da banda de condução. Por sua vez, se átomos A e B são de natureza distinta, interessantes efeitos de polarização de spin podem levar à existência de uma magnetização líquida não-nula para a cadeia. O estudo se completa com a análise dos efeitos sobre a estrutura eletrônica se uma impureza substitucional é introduzida em um dos sítios tipo A .

MOBILIDADE DE DEFEITOS CONFORMACIONAIS EM POLI(3-HEXIL)TIOFENO.

BRITO, A. N. DE; SILVA, G. M. E

UnB

Estudou-se neste trabalho o modelo de interação eletrônica torsional em uma cadeia quase unidimensional de poli(3-hexil)tiofeno (P3HT). O modelo admite defeitos de conformação suave, como também, sólitons topológicos e pólarons. O modelo mostra que a dinâmica destes defeitos pode ser estudada através de simulações numéricas, ou seja, integração da correspondente equação de Schrödinger dependente do tempo acoplada aos graus de liberdade torsionais. ^a. Este modelo para os sólitons possibilita a inclusão das interações entre as cadeias. Utilizou-se para a obtenção da mobilidade dos defeitos a ação de um campo elétrico externo. Os resultados para uma conformação totalmente planar também serão discutidos. Este método tem sido aplicado com muito sucesso para descrever a dinâmica de sólitons em poliacetileno.

^aY. Ono and A. Terai, J.Phys. Soc. Jpn. 59, 2893 (1990).

Crescimento e Caracterização de Compostos Poliméricos (POL) - 10/06/94

FABRICAÇÃO DE FILMES DE POLIÁCIDOS COM POLIANILINAS PELA TÉCNICA DE AUTO-MONTAGEM.

ZUCOLOTO, V.; MATTOSO, L. H. C.; OLIVEIRA JR, O. N. DE
IFQSC/DFCM/USP

A processabilidade de polímeros condutores tem sido extensivamente investigada para que tais materiais possam ser aplicados tecnologicamente. Uma das alternativas mais atraentes é a fabricação de filmes ultrafinos, com alto grau de ordenamento estrutural. Neste trabalho, filmes ultrafinos (da ordem de nm), foram obtidos através da deposição alternada de polycations e poliânions, com uma técnica denominada Auto-Montagem ("self-Assembly"). Como polycation foi utilizada poli(o-metoxianilina) dopada com ácido clorídrico, obtida pela polimerização química do monômero com persulfato de amônio em HCl 1.0 M a 0 °C. O poliânion utilizado foi o poli(ácido-vinil-sulfônico). A técnica para obtenção de filmes por Auto-Montagem, consiste em se depositar por imersão em um substrato de vidro altamente hidrofílico o polycation e em seguida o poliânion, e assim sucessivamente obtendo-se bicamadas. Tal processo de deposição foi monitorado a cada bicamada depositada por espectroscopia ultra-violeta /visível, verificando-se um aumento na absorbância na faixa de 600 a 700 nm. Estão sendo utilizados como principais parâmetros de estudo: a dependência do tempo de deposição da primeira e segunda monocamadas, a influência da concentração e do pH das soluções, os efeitos de reversibilidade da dopagem, além de medidas de condutividade e espessura.

RE-CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE LANGMUIR DE COMPOSTOS ALIFÁTICOS

BONARDI, C.; OLIVEIRA JR, O. N. DE
USP-IFQSC

A medida do potencial de superfície é uma das técnicas mais empregadas na caracterização de filmes de Langmuir. Embora ela esteja sendo empregada há mais de 60 anos, até há poucos anos as curvas de potencial de superfície em função da área média por molécula não eram reprodutíveis, e os valores do potencial obtidos para valores grandes de área eram maiores que

zero. Mais recentemente, em experimentos realizados com ácido esteárico, observou-se que o potencial de superfície era nulo para valores de área maiores que um certo valor de área crítica A_c . Concluiu-se que os resultados anteriormente obtidos eram causados por impurezas na subfase aquosa. Uma re-análise de medidas para vários compostos simples, apresentadas na literatura, se faz necessária. Neste projeto, utilizamos os ésteres esteárico, araquídico e behênico, os álcoois esteárico, araquídico e behênico e a amina esteárica. Os resultados comprovam a expectativa inicial de que, se a subfase aquosa for devidamente purificada, o potencial de superfície para compostos simples é praticamente nulo para grandes áreas por molécula. Existe ainda uma área crítica onde o potencial inicia sua subida, contradizendo resultados antigos. Os valores de potencial na fase condensada e as curvas de pressão de superfície, no entanto, são próximos daqueles publicados anteriormente. As áreas críticas a partir das quais o potencial inicia sua subida oscilam em torno de 50 \AA^2 . A fim de completar esses estudos, estão sendo realizados experimentos com esses mesmos compostos em subfases com diferentes pHs, para investigar o efeito da ionização dos filmes.

FILMES LANGMUIR - BLODGETT DE POLIANILINA DOPADA COM ÁCIDOS FUNCIONALIZADOS

RIUL JR, A.; MELLO, S. V.; MATTOSO, L. H. C.;
TELLES, G. D.; OLIVEIRA JR, O. N. DE
USP-IFQSC

A fabricação de filmes Langmuir-Blodgett (LB) de polianilina dopada é descrita neste trabalho. Embora filmes LB de derivados da polianilina já tenham sido produzidos por vários laboratórios, esta é a primeira vez que se obtêm filmes de polianilina pura. O maior obstáculo vencido foi a baixa solubilidade da polianilina em solventes orgânicos. Conseguimos solubilizar a polianilina em clorofórmio, dopando-a com ácidos protônicos funcionalizados (ácido cânfora sulfônico e tolueno sulfônico). Tais ácidos agem como indutores de solubilidade. Filmes de Langmuir foram formados a partir de soluções de clorofórmio espalhadas sobre subfases ácidas, com pH igual a 2. A pressão de colapso destes filmes é superior a 30 mN/m, e eles podem ser transferidos para substratos sólidos através do método de imersão vertical. A taxa de transferência (TR) varia entre 0.6 e 0.8, quando os filmes Langmuir-Blodgett são depositados sobre lâminas de vidro.

**ESTUDO DA FOTOLUMINESCÊNCIA DE
HETEROESTRUTURAS DE
POLI(p-FENILENO VINILENO)
FABRICADOS PELA TÉCNICA DE
AUTO-MONTAGEM**

FERREIRA, M.; RUBNER, M. F.
Massachusetts Institute of Technology

Heteroestruturas compostas por finas camadas de um precursor iônico do poli(p-fenileno vinileno), (PPV), alternadas com diferentes políons foram fabricadas, utilizando-se a técnica de auto-montagem (ou *self-assembly*). Esta técnica, baseada na adsorção espontânea de polímeros carregados sobre uma superfície, a partir de uma solução diluída do polímero, permite a fabricação de estruturas organizadas na forma de camadas com rígido controle de espessura. A conversão do material precursor depositado para sua forma conjugada foi realizada mediante tratamento térmico. Observou-se que filmes compostos por PPV alternado com um políon inerte, como poliestireno sulfonado (PSS), apresentam intensa fotoluminescência em comprimento de onda característico do material puro. Caso os filmes sejam fabricados alternando-se camadas do polímero conjugado com materiais aceitadores de elétrons, como poli(tiofeno 3-ácido acético) (PTAA) ou C₆₀ sulfonado, significativa redução na intensidade da banda de emissão é obtida. Estudos de UV-visível demonstraram não ocorrer qualquer tipo de interação entre os materiais no estado fundamental, visto que a banda de absorção do filme resultante é formada praticamente pela superposição dos espectros de ambos os materiais, PPV/PTAA ou PPV/C₆₀. Os três compostos absorvem na mesma região do espectro, descartando a possibilidade de reabsorção da energia radiativa emitida. Propõe-se, portanto, que a interação entre o PPV e os materiais aceitadores no estado excitado, conduz a um processo de relaxação não radiativo podendo envolver a transferência fotoinduzida de cargas. Controlando-se a distância entre as camadas emissora e aceitadora, pela inserção de camadas intermediárias inertes e de espessura conhecida, observa-se gradual recuperação da fotoluminescência. Entretanto, o formato do espectro bem como o comprimento de onda diferem do material original, sugerindo a formação de um novo complexo no estado excitado, característico da combinação de materiais.

**BLENDAS DE DERIVADOS DE
POLIANILINA E POLI(FLUORETO DE
VINILIDENO)**

MALMONGE, L. F.
Depto. de Ciências/UNESP - Ilha Solteira SP
NOGUEIRA, J. DE S.
Depto. de Física/ICET - UFMT - Cuiabá MT
MATTOSE, L. H. C.
IFQSC/DFCM - USP - São Carlos SP

A fabricação de blendas é um método bastante promissor para unir as boas propriedades mecânicas dos polímeros convencionais com as propriedades eletroativas dos polímeros conjugados. Neste trabalho nós estudamos o processamento de blendas de poli(fluoreto de vinilideno) (PVDF) e poli(o-metoxianilina) (POMA). Os filmes foram produzidos por solução contendo várias proporções de PVDF e POMA. Pelo fato da POMA apresentar alta solubilidade, ela pode ser dopada por diferentes maneiras: i) dopagem do polímero em pó, antes da sua dissolução; ii) dopagem da blenda dissolvida em solução; iii) dopagem do filme pronto. Estas blendas foram caracterizadas medindo-se a condutividade, polarização dielétrica e medidas de corrente termoestimulada (TSC). A condutividade destas blendas aumenta consideravelmente com o acréscimo da concentração da POMA dopada na blenda. As medidas de TSC apresentaram um pico em torno de 80°C para os dois polímeros puros, o PVDF e a POMA não dopada. Este pico está associado com a temperatura de transição vítrea. Quando a POMA é submetida a temperaturas maiores que 150°C, ocorre a formação de ligações cruzadas, desaparecendo o pico de TSC. Estas blendas podem ser estiradas em até cinco vezes o seu comprimento inicial, pelo método de estiramento por zona, promovendo uma mudança de fase do PVDF de α para β . O comportamento dielétrico das blendas dopada e não dopada são comparadas com os dos polímeros puros.

**PROCESSOS DE QUEBRA E REARRANJO
DE LIGAÇÕES NO PPS POR
BOMBARDEIO COM ÍONS DE ALTA
ENERGIA.**

FARENZENA, L. S.; LIVI, R. P.
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
ARAÚJO, M. A. DE
Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
PAPALÉO, R. M.; HALLÉN, A.; SUNDQVIST, B. U.
R.
Div. de Física de Íons, Depto. de Ciências da Radiação, Univ. de Uppsala, Suécia.

Folhas finas de Poli(sulfeto de p-fenileno) (PPS), com 2 μm de espessura, foram bombardeadas com os íons $^1\text{H}^+$ (380 KeV) e $^4\text{He}^{++}$ (760 KeV) no implantador de íons HVEE de 400 KV em Porto Alegre e com os íons $^{32}\text{S}^{+3}$ (19.7 MeV) e $^{79}\text{Br}^{+9}$ (48.6 MeV) no acelerador EN-TANDEN VAN DER GRAAF em Uppsala (Suécia), com doses entre 10^{10} e 10^{15} íons/cm². As amostras foram analisadas através da espectroscopia de absorção no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), sendo assim possível acompanhar a evolução dos processos de quebra e rearranjo de ligações no PPS em função da densidade de energia depositada no ma-

terial (Φ^* (eV/mero)). Foi estudada a variação da absorvância (normalizada pela absorvância do PPS pristine) contra Φ^* . Para os íons S e Br foi encontrada uma mesma taxa de decaimento da absorvância contra Φ^* , fazendo as curvas sobrepor-se, enquanto que para os íons H e He o decaimento é bem menos acentuado. A banda que apresentou uma maior queda na absorvância em função de Φ^* foi a banda centrada em 554 cm^{-1} que corresponde à vibração da fenila ligada ao S. Nas amostras irradiadas com Br obtivemos para a banda de 554 cm^{-1} uma seção de choque $\sigma=1.5 \times 10^{-12}\text{ cm}^2$, o que corresponde a um raio de modificação de cerca de 70 \AA em torno da trajetória do íon, dentro do qual as ligações correspondentes à referida banda são quebradas. Observamos também um aumento da absorção normalizada de algumas bandas, entre elas a centrada em 1574 cm^{-1} , que se deve à conjugação do anel aromático a grupos insaturados, o que indica estar havendo reticulação no polímero.

Trabalho parcialmente financiado por FINEP, CNPq e FAPERGS.

CINÉTICA E DINÂMICA MOLECULAR DE SUPERFÍCIES LÍQUIDAS: A Exceção do Grupo Metila como Doador Eficiente de Energia

QUINTELLA, C. M.
UFBA

MCCAFFERY, A. J.; KENYON, A. J.; ZIDAN, M.
MOLS, Univ. of Sussex, UK

Apesar de se ter um conhecimento amplo das características macroscópicas do estado líquido, muito pouco se conhece a nível de interações moleculares. Aqui se apresenta um método experimental¹ que interage somente com a primeira camada molecular sendo aplicável a superfícies moleculares altamente complexas e fornecendo características da cinética e dinâmica da interação gás-superfície líquida². Um feixe molecular supersônico pulsado, de iodo com energia 2500 cm^{-1} , é espalhado pela superfície líquida de *Polidimetilsiloxano* a 300 K . Usando *LIF* se verifica que as moléculas fisissorvidas e posteriormente desorvidas³ apresentam temperaturas vibracionais inferiores a 200 K contrariamente à completa termalização esperada, *i. e.*, 300 K . A superfície deste polímero é composta de grupos metila com modos vibracionais de 2900 cm^{-1} a 3000 cm^{-1} . Neste caso particular se verificou que existe uma co-operação entre as várias ligações *C-H*, gerando um alargamento de banda de 800 cm^{-1} e ocasionando a ressonância com o feixe de iodo. Assim as moléculas desorvem antes de estarem vibracionalmente termalizadas. Este é um exemplo simples e proveitoso da aplicação do método ao estudo dos fenômenos moleculares das superfícies líquidas. 1 AJ Kenyon, AJ McCaffery, CM Quintella, MD Zidan, *J. Chem Soc. Faraday Trans.*, 1993, 89(21), 3877-3884. 2 AJ Kenyon, AJ McCaffery,

CM Quintella, MD Zidan, *Faraday Discuss.*, 1993, 96, 000-000.

3 CM Quintella, AJ McCaffery, MD Zidan, *Chem. Phys. Lett.*, 1993, 214(6), 563-568.

Filmes Langmuir-Blodgett de poli(3-butiltiofeno) e ácido esteárico

PAWLICKA, A.; N, O. J. O.; AEGERTER, A. M.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Filmes Langmuir-Blodgett (LB) foram obtidos de camadas mono-moleculares mistas de poli(3-n-butiltiofeno) (P3BT) e ácido esteárico, em diferentes razões molares. O P3BT foi sintetizado via oxidação química do monômero 3-butiltiofeno, usando FeCl_3 como oxidante. O pó do polímero dissolvido em CHCl_3 , e filtrado para eliminar impurezas e partes insolúveis, foi misturado com uma solução de ácido esteárico (SA) pouco antes de se espalhar a monocamada (chamado filme de Langmuir). Os filmes LB foram depositados pelo método tradicional, de imersão vertical do substrato sobre lâminas de vidro recobertas por um filme fino de ITO em uma das suas faces. As taxas de transferência foram da ordem de 0.8, para velocidades de imersão de 1 mm/min . Medidas iniciais de profilometria indicam uma espessura média por camada de 30 \AA para a razão molar 2:1 (SA/P3BT), a 80 \AA para filmes de 1:2 (SA/P3BT). Estas espessuras são superiores às publicadas na literatura para filmes LB mistos de P3BT e estearato de cádmio, provavelmente devido às diferentes massas moleculares médias do P3BT. Nosso polímero tem massa aproximadamente 4 vezes maior do que os polímeros preparados em outros laboratórios. Os filmes LB estão sendo caracterizados por espectroscopia UV/visível e voltametria cíclica, mostrando que eles conservam as propriedades características de filmes puros de P3BT obtidos por evaporação de uma solução polimérica.

CARACTERIZAÇÃO E MONITORAÇÃO VIA ESPALHAMENTO QUASE-ELÁSTICO DE LUZ DA SÍNTESE DO POLI(METIL.META.ACRILATO)

TEIXEIRA, A. V. N. C.; LICINIO, P.

Departamento de Física - UFMG Caixa Postal 702 - Belo Horizonte - MG

Investigamos a cinética da polimerização do PMMA, utilizando as técnicas ópticas de espalhamento quase-elástico estático e dinâmico de luz. Obtivemos assim dados sobre as taxas da reação radicalar e energias de ativação. Os coeficientes de difusão e raios hidrodinâmicos dos produtos foram obtidos pela técnica de correlação de fótons. Já as medidas de intensidade absoluta do espalhamento, em função da concentração e ângulo de espalhamento fornecem os pesos moleculares e raios de giração dos produtos. A intensidade da luz

espalhada pela dispersão cresce com a concentração até a concentração de recobrimento c^* , quando passa a decair. Este resultado pode ser interpretado em termos da interação entre os polímeros ou das flutuações térmicas no meio e é analisado em termos da teoria de des Cloiseaux para a pressão osmótica em regime semidiluído.

Estudo da Difusão Térmica de Xe e Cs Implantados em Filmes Poliméricos

KASCHNY, J. R. DE A.; BEHAR, M.
Instituto de Física - UFRGS

No presente trabalho apresentamos os resultados do estudo da difusão térmica de Xe e Cs implantados no fotoresiste AZ1350. As implantações de Xe foram efetuadas a uma temperatura de 80 K e os perfis de concentração determinados "in situ" pela técnica de RBS na faixa entre 90 e 573 K. O coeficiente de difusão encontrado segue um comportamento tipo Arrhenius possuindo uma energia de ativação $E_b = 100$ meV. Experimentos similares realizados com Cs na faixa de temperaturas entre 237 a 573 K mostram uma energia de ativação $E_b = 205$ meV. Este resultado mostra também que o processo difusivo segue um mecanismo de "trapping" e "detrapping". O valor encontrado para a energia de detrapping é $E_t = 230$ meV para o Xe e $E_t = 340$ meV para o Cs. As diferenças encontradas para estes dois íons fornece uma indicação que o processo de difusão é fortemente influenciado pelas propriedades químicas do elemento implantado.

Estudos de Polianilinas (POL) - 10/06/94

ESTUDOS DE CONDUTIVIDADE AC EM POLIANILINA E POLI(o-METOXIANILINA)

NOGUEIRA, J. DE S.
Depto. de Física/ICET - UFMT - Cuiabá MT
MATTOSO, L. H. C.; FARIA, R. M.
IFQSC/DFCM - USP - São Carlos SP

Nos últimos anos os polímeros condutores têm sido largamente estudados devido às suas propriedades elétricas e óticas não convencionais e, principalmente, por apresentar inúmeras possibilidades de aplicações em áreas tecnológicas. A polianilina e seus derivados se destacam pela facilidade de dopagem aliado a uma excelente estabilidade no estado dopado. Nesse trabalho apresentaremos alguns estudos de impedância em filmes de polianilina (PANI) e um derivado, poli(o-metoxianilina) (POMA). PANI e POMA foram preparados pela polimerização química oxidativa dos respec-

tivos monômeros em HCl 1,0 M a 0°C, com persulfato de amônia. Os polímeros na forma de pó esverdeado (dopado) foram então desdopados por desprotonação com 0,1 M de NH_4OH sendo obtidos no estado de base de emeraldina (EB). A preparação de filmes flexíveis e auto suportáveis foi realizada por evaporação de solução ("casting") com n-metilpirrolidona. A impedância destes filmes poliméricos foi estudada no intervalo de frequência de 10^{-2} a 10^5 Hz, variando-se, como parâmetros: dopagem, temperatura e a umidade relativa (UR) do ambiente.

Resonant Scattering from Non-Symmetric Dimers: Applications to Substituted Polyanilines

SANTOS, M. C. DOS; GALVÃO, D. S.; LAKS, B.
Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas 13081-970 Campinas, SP
LAVARDA, F. C.

Departamento de Física, UNESP-Bauru, 17033 Bauru SP

In this work we show that, contrary to the prediction of the Random Dimer Model [Wu and Phillips, Phys. Rev. Lett. 66, 1366 (1991)], it is possible to have resonant scattering from non-symmetric dimers. It is shown by direct density of states calculations as well as by a procedure similar to the Random Dimer Model that protonated chains of alkyl-substituted polyanilines support extended electronic states at the Fermi energy when a disordered distribution of bipolarons is present. An extension of the Random Dimer Model to include resonant scattering by non-symmetric dimers is proposed.

ESTUDO DA POLIMERIZAÇÃO DA DIFENILAMINA

PEREIRA NETO, J. R.
EFEI
BASTOS, T. C.
Rhodia S.A e IFUSP
CALDAS, M. J.
IFUSP

Com o objetivo de investigarmos propriedades de cadeias longas, temos feito estudos de cadeias curtas. Iniciando pelo dímero, formado por dois benzenos, fomos acrescentando anéis benzênicos até atingir um fragmento de seis anéis. Estudamos ainda a difenoquinonediiimina (com quatro anéis) e a emeraldina (seis anéis). Para otimizar a geometria, foram feitos cálculos com o MNDO, PM3 e AM1. Até os presentes propósitos, estes métodos se mostraram equivalentes. Os primeiros resultados indicam que os ângulos nos dímeros são muito grandes (da ordem de 80 graus) e tendem a diminuir à medida que acrescentamos anéis. Entretanto ainda permanecem, na maioria dos casos, relativamente grandes (da ordem de 50 graus). Essa geometria, difi-

cilmente associável a um plano, pode ser preocupante para modelos que, na maioria das vezes, se baseiam nos elétrons π . Um outro aspecto é que a adição de cada anel à cadeia necessita de um calor de formação que ainda continua crescente até seis anéis, se bem que nota-se uma clara tendência à estabilização. Isto nos indica que devemos ter uma cadeia muito longa.

ADSORÇÃO DE ÍONS COBRE (II) EM POLIANILINA

MELO, J. V. DE; DINIZ, F. B.; AZEVEDO, W. M. DE; SOUZA, J. M. DE

Departamento de Química Fundamental - UFPE

MAGON, C. J.; SOUZA, P. H. DE

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

Neste trabalho apresentamos resultados da interação de íons de cobre (II) com polianilina. Quantidades fixas de polianilina, preparada quimicamente (1), foram expostas a soluções de nitrato de cobre em metanol, de diferentes concentrações, sob agitação, com temperatura controlada em 25 graus centígrados, por 23 horas. Determinações volumétricas foram feitas para se determinar a variação na concentração de cobre como resultado de sua adsorção na polianilina. Os resultados mostram que a adsorção obedece à isoterma de Langmuir. O nível de adsorção corresponde em média a uma faixa de 1 íon de cobre para 27 a 14 grupamentos amina/imina da cadeia polimérica. Amostras de polianilina dopada com HCl ($PAHCl$) desdopada (lavada com hidróxido de amônia) ($PANH_3$) e com cobre adsorvido $PACu$ foram analisadas por EPR. A largura de linha dos espectros de EPR aumenta com o aumento da dopagem da polianilina, variando de 8,0 Gauss na $PANNH_3$ para 233,0 Gauss na $PAHCl$. Este comportamento indica um aumento de condutividade com a dopagem. O fator giromagnético vale 2.0020 na $PANH_3$, 2.0182 na $PACu$ e 1.9842 no $PAHCl$. Caracterização por espectroscopia de FTIR e UV-Vis de amostras desdopada, exposta a metanol, e com cobre adsorvido também foi realizada. Os resultados dos espectros indicam que a amostra tratada com cobre apresenta características de um material ligeiramente mais

oxidado (indicado pela intensidade relativa das bandas situadas a 1500 e 1560 cm^{-1} [2]), e com um leve grau de dopagem [2,3], indicado pela banda em 1160 cm^{-1} na região do infravermelho e no intervalo de 900 a 700nm, 600 e 430nm na região do visível.

[1] H. Kusmany e N.S. Sariciffi, *Synth. Met.*, 18 (1987) 353.

[2] Jinsong Tang, Xiabin Jing, Baochen Wang e Fosong Wang, *Synth. Meth.*, 24 (1988) 231.

[3] Rongzhong Jjiang e Shaojjun Dong, *Synth. Met.*, 24 (1988) 255.

Trabalho Financiado pelo CNPq e FINEP

ESTUDO DA ABSORÇÃO ÓTICA DE FILMES FINOS DE POLI(O-METOXIANILINA) DOPADOS E NÃO DOPADOS EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA.

ALBUQUERQUE, J. E. DE

Universidade Federal de Viçosa

FARIA, R. M.

USP/IFQSC/DFCM

Espectros de absorção ótica de filmes finos de poli(o-metoxianilina) (POMA), dopados e não dopados, feitos sobre uma placa de vidro por spin-coating, foram medidos em função da temperatura, utilizando a técnica de Espectroscopia por Transformada de Fourier. São estudados a variação da intensidade da banda de absorção, em torno de 600 nm, da POMA não dopada e o deslocamento desta posição com a variação da temperatura, de 300 K a 77 K. São observados deslocamentos da banda de absorção e variação na sua intensidade, sendo consistente com a observação da variação da condutividade com a temperatura. O mesmo estudo é feito em filmes de POMA dopados com ácido clorídrico. Estudos preliminares indicam que, com o aumento da dopagem, há um deslocamento da banda de absorção, em 600 nm, em direção a maiores comprimentos de onda, indicando um aumento da condutividade dos filmes.

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

Workshop: Ressonância Paramagnética Eletrônica Pulsada (RES)
 - 09/06/94

A TÉCNICA DE ELECTRON SPIN ECHO ENVELOPE MODULATION BI-DIMENSIONAL 2D-ESEEM

VUGMAN, N. V.
Instituto de Física, UFRJ

A medida da intensidade do eco estimulado gerado por uma sequência de três pulsos de $\pi/2$ em função do intervalo de tempo T entre o segundo e o terceiro pulso (mixing time) pode revelar modulações devidas às interações magnéticas com núcleos da vizinhança do centro paramagnético em estudo (ID-ESEEM). A transformada de Fourier deste espectro revela linhas semelhantes às linhas encontradas em Ressonância Dupla Eletron Núcleo (ENDOR). A intensidade de suas linhas, entretanto, é modulada por uma função que depende do tempo τ entre os dois primeiros pulsos e das frequências ENDOR envolvidas, dando origem a efeitos de supressão. Além disto, os espectros podem ser complicados pela presença de um grande número de linhas, dificultando a identificação dos conjuntos correspondentes à interação com um núcleo específico. A técnica 2D-ESEEM é baseada na variação independente de T e τ . Os conjuntos de dados são transformados Fourier em relação a T e a τ , compondo um espectro bi-dimensional que, dependendo da maneira com que a transformada de Fourier é realizada, apresenta picos diagonais e linhas de combinação de frequências, ou linhas correspondentes às duas frequências ENDOR correlacionadas definindo um ponto em um espaço de frequências. A técnica 2D-ESEEM permite, portanto, identificar pares de linhas correspondentes, além de possibilitar a medida do sinal relativo das interações hiperfinas entre núcleos magnéticos não equivalentes e o eletron não emparelhado.

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA PULSADA

MAGON, C. J.
Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Os recentes avanços na tecnologia de microondas e na eletrônica digital permitiram a construção de espectrômetros de RPE-Pulsado de resposta rápida e de alta sensibilidade. Este fato fez nascer uma nova área de estudo para os pesquisadores que até pouco tempo atrás se utilizavam apenas da técnica convencional de onda contínua (CW) para estudar sistemas paramagnéticos de interesse em química, biologia e física. A ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) no domínio do tempo (Pulsada) tornou-se então uma ferramenta muito útil e importante para o estudo dos processos envolvidos na relaxação do spin eletrônico tanto em substâncias líquidas como sólidas. Resultados experimentais a respeito da relaxação do spin eletrônico são importantes porque eles podem fornecer informações detalhadas a respeito do movimento molecular do centro paramagnético, além de informações das propriedades estruturais e dinâmicas da vizinhança do centro paramagnético. Esta nova técnica exige uma instrumentação sofisticada e de alto custo econômico. Além disso, do ponto de vista teórico, a análise dos resultados experimentais é certamente não trivial. Por estes motivos, tem-se a impressão de que a técnica de RPE-Pulsado parece destinada a permanecer sob o domínio de alguns poucos pesquisadores especializados. Assim, esta palestra tem o objetivo de apresentar aos interessados, especialistas ou não, uma introdução ao tema, focalizando em especial os métodos de saturação-recuperação e de spin-eco. Além de uma discussão introdutória sobre as técnicas mais comuns, mostraremos também algumas de suas aplicações em problemas de interesse em várias áreas de pesquisa. Nosso objetivo maior é fornecer ao "não especialista" elementos básicos que o auxiliem a decidir se as técnicas de RPE-Pulsado podem (ou não) ajudá-lo no seu projeto de pesquisa.

INSTRUMENTAÇÃO EM RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA PULSADA

COELHO NETO, J. A.

Instituto de Física, UFRJ

A técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) pulsada consiste na aplicação de uma sequência de "pulsos" de microondas à amostra em estudo, observando-se a seguir a evolução temporal da magnetização em um plano perpendicular ao campo magnético estático aplicado. Diversos arranjos experimentais existem, para que esta experiência possa ser levada a efeito. Os dados obtidos podem ser analisados diretamente no domínio temporal, caso se deseje uma medida dos tempos de relaxação ou da cinética de algum processo, ou então convertidos para o domínio de frequências pela Transformada de Fourier, caso seja necessária a informação espectral sobre a amostra. Concentraremos nossa discussão nas características básicas do Espectrômetro de RPE Pulsada da marca BRUKER, modelo ESP380e, recém adquirido pelo Grupo de Aplicações de RPE do Instituto de Física - UFRJ. O espectrômetro ESP380e é um equipamento de aplicação geral, funcionando em banda X (9-10 GHz), tanto no modo de onda contínua (CW) como no modo pulsado. Possui, dentre outras, uma cavidade dielétrica de fator de qualidade variável entre aproximadamente 100 e 6000. Tal cavidade encontra-se inserida em um criostato, para operação em temperatura variável de 4 a 300K. A fonte de microondas deste espectrômetro é uma válvula Klystron de 1 W de potência de saída. Conectada à mesma está um conjunto de relés coaxiais e acopladores direcionais, que dirigem as microondas seletivamente, conforme o modo de operação escolhido, para os braços de CW, de pulsos de baixa potência ou de pulsos de alta potência, sendo as microondas neste último amplificadas até a potência de 1 kW por um amplificador externo tipo "Travelling Wave Tube" (TWT), inserido no circuito. Outras derivações existentes no circuito de microondas permitem a polarização do diodo detetor de onda contínua e dos misturadores detetores em fase e quadratura do sinal resultante. A geração dos pulsos de microondas no modo de pulsos de alta potência é feita em uma unidade de chaveamento com até oito canais operando em paralelo, com ajustes independentes de fase e amplitude (o espectrômetro em uso possui dois canais instalados). O controle do chaveamento dos pulsos e da digitalização dos sinais é feito por um programador de pulsos digital, o qual opera com frequência de "clock" de 125 MHz, permitindo a geração de pulsos a partir de 8 ns de duração, em múltiplos de 8 ns. Até 16383 pulsos podem ser gerados em cada canal. A digitalização dos sinais obtidos é feita com até nove bits de resolução, um ponto por sequência. Desta forma, toda a sequência é repetida diversas vezes com o deslocamento em passos uniformes do gatilho de digitalização, para a obtenção da evolução temporal completa destes sinais. Todo o conjunto do espectrômetro está conectado a um computador central baseado no processador 68040, da Motorola, o qual realiza o controle do espectrômetro, aquisição e tratamento de dados e simulação de espectros através de "software" fornecido com o equipamento.

Ressonância Paramagnética Eletrônica (RES) - 09/06/94

EPR PULSADA (TÉCNICA ESEEM) E ESPECTROSCOPIA ENDOR EM HEXACIANETO DE RÓDIO DIVALENTE EM REDE DE KCl

VUGMAN, N. V.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Monocristais de hexacianeto de ródio em rede de KCl, submetidos à radiação gama, mostram interessantes modulações do envelope do eco de spin, ESEEM, em experiências com sequências de três pulsos de $\pi/2$. A transformada de Fourier destas modulações revela um espectro semelhante ao espectro ENDOR, com frequências bem definidas. Gráficos tri-dimensionais de experiências em função do tempo τ entre os dois primei-

ros pulsos permitem visualizar os multipletes e ajudam a identificar suas linhas. Neste trabalho foram medidas pela primeira vez interações hiperfinas magnéticas e quadrupolares com os cianetos equatoriais destes complexos. Por outro lado, a espectroscopia ENDOR direta nos permitiu realizar estudos de variações angulares, fornecendo detalhes sobre a distorção local da rede hospedeira.

FATOS E ARTEFATOS EM ESPECTROSCOPIA POR RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA PULSADA

COELHO NETO, J. A.; VUGMAN, N. V.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

A obtenção de espectros de Ressonância Paramagnética pulsada, seja por Transformada de Fourier ou por varredura de campo magnético, requer cuidados especiais

com o processamento dos sinais adquiridos, para que não ocorram distorções no espectro resultante, algumas das quais capazes de confundir os mais experientes pesquisadores e até levá-los a erros de interpretação. São analisadas neste trabalho as principais características da técnica de RPE pulsada, a influência de fatores tais como o tempo morto de digitalização, a taxa de amostragem do sinal, a largura de banda do receptor, os processos de relaxação existentes na amostra e o tipo e a duração da sequência de pulsos empregada, na criação de "artefatos" no espectro resultante. São também discutidas as técnicas empregadas para correção ou minimização deste problema, tais como correção de tempo morto, apodização, "phase cycling", uso de pulsos seletivos e filtragem. Como ilustração destas técnicas, são apresentados exemplos de espectros de amostras diversas obtidos sem e com o emprego das mesmas.

DEPENDÊNCIA COM CAMPO MAGNÉTICO DA TRANSIÇÃO $^4A_2 - ^2E$ E $^2E - ^4A_2$ DO Cr^{3+} EM $GdAlO_3$

BASSO, H. C.; CARVALHO, R. A.; TERRILLE, M. C.
Instituto de Física e Química de São Carlos

Em trabalhos anteriores^(1,2), mostramos a forte dependência das propriedades óticas (absorção e tempo de vida do estado excitado) do íon Cr^{3+} em $GdAlO_3$ com a intensidade e direção, em relação aos eixos cristalinos, de um campo magnético externo. Neste trabalho analisamos os resultados anteriores, principalmente posição e intensidade de absorção em função da polarização da luz, propondo um modelo onde se assume a existência de dois sítios cristalinos para o cromo e, com base em dados cristalográficos, de um eixo de rotação C_4 paralelo ao eixo cristalino (b). Com isso, utilizando as propriedades de simetria local do íon, calculamos as intensidades de transição dos subníveis de 4A_2 para os de 2E . Apresentaremos também, novos resultados obtidos com o bombeio seletivo da transição em estudo. (1) Helman J. S. et al. Phys. Rev. B 44,6878(1991) (2) Basso H. C. et al. . Aceito no Int. Conf. of Lum. Opt. Spec. Sol.

ESPECTROSCOPIA DE RPE E ÓPTICA DE Er:LiNbO₃

MILORI, D. M. B. P.

IFQSC-USP

MORAES, I. J.

IMF-UFG

HERNANDES, A. C.; SOUSA, R. R. DE; SIU-LI, M.;

TERRILE, M. C.

IFQSC-USP

BARBERIS, G. E.

IFGW-UNICAMP

Neste trabalho apresentamos um estudo das interações do íon Er^{3+} com os íons do cristal hospedeiro $LiNbO_3$,

baseado na análise dos resultados de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) e espectroscopia óptica. Determinamos os factores $g_{//}$ e g_{\perp} a partir das medidas da variação angular dos espectros de RPE, obtidos em banda X (9 GHz) na temperatura de helio líquido. Por outro lado, com a espectroscopia óptica de emissão e absorção, determinamos os níveis de energia do estado fundamental e varios excitados. Ajustamos um Hamiltoniano com a simetria do sítio ocupado pelo íon Er^{3+}

$$\hat{H} = B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0 + B_6^0 O_6^0 + B_4^3 O_4^3 + B_6^3 O_6^3$$

e determinamos os valores dos parâmetros de campo cristalino e a função de onda do estado fundamental em concordancia com os resultados espectroscópicos.

RPE DE ÍONS Fe^{3+} EM MONOCRISTAIS E FIBRAS DE $LiNbO_3$.

SANTANA, R. C. DE; HERNANDES, A. C.; LIMA, C.
J.; ANDREETA, M. R. B.; TERRILE, M. C.
USP-Instituto de Física e Química de São Carlos.

Monocristais de Niobato de Lítio puros ou dopados exibem várias propriedades físicas, birrefringência, efeito fotovoltaico, etc, que implicam em aplicações tecnológicas tais como geradores de segundo harmônico, entre outras. Neste trabalho investigamos o $LiNbO_3$ dopado com o íon Fe^{3+} em diferentes concentrações através da técnica de R.P.E.. Os monocristais e fibras de $LiNbO_3$ foram crescidos pelos métodos de Czochralski e fusão a laser, respectivamente, nos laboratórios do Grupo de Crescimento de Cristais do DFCM/IFQSC. As medidas foram realizadas em duas frequências de microondas, banda X (9.5 GHz) e banda Q (34 GHz). Analisamos a variação angular dos espectros com o campo magnético aplicado nos planos cristalinos ab, bc e ca, em ambas as frequências de trabalho e determinamos os valores dos parâmetros g, e de campo cristalino B_2^0 e B_4^0 . Analisamos também a forma de linha a partir das medidas efetuadas em banda Q, que mostraram ser semelhantes a forma de linha de Dyson. No interesse de determinar o sítio que o íon Fe^{3+} ocupa, estudamos alguns importantes mecanismos que contribuem para o desdobramento de campo zero do nível fundamental deste íon, tais como spin-órbita, spin-spin e campo cristalino.

RPE EM PASTILHAS Prensadas DE POLI (3-METILTIOFENO) DOPADAS COM ClO_4^-

WALMSLEY, L.

*Departamento de Física, Instituto de Geociências e
Ciências Exatas, UNESP, Rio Claro- SP*

PEREIRA, E. C.; BULHÕES, L. O. S.

*Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmica,
Dpto de Química, Universidade Federal de São Carlos.*

PAWLICKA, A.; NASCIMENTO, O. R.; FARIA, R. M.
*Departamento de Física e Ciência dos Materiais, Instituto
 de Física e Química de São Carlos, USP.*

Poli (3-Metiltiofeno) (P3mT) dopado com ClO_4^- foi sintetizado eletroquimicamente a temperatura ambiente usando um potencial constante de 1,48 V a partir de uma solução de acetonitrila com 0,1 M de metiltiofeno e 0,1 M de LiClO_4 . O pó resultante foi prensado para formar pastilhas com espessura variando entre 30 μm -600 μm . Medidas de ressonância paramagnética eletrônica (RPE) foram realizadas em banda X (9,4 GHz) para amostras resfriadas lentamente a partir da temperatura ambiente na faixa de $110 \text{ K} \leq T \leq 300 \text{ K}$ e para amostras em que se fez um resfriamento rápido até 110 K e depois a temperatura foi aumentada rapidamente até ambiente. Para essas medidas obtivemos dados de condutividade a.c. (9,4 GHz), susceptibilidade para-magnética e largura de linha. Outras medidas foram realizadas com amostras que foram resfriadas lentamente até 110 K, depois bruscamente até 77 K, guardadas nessa temperatura por 12 horas, resfriadas rapidamente para 4,2 K e então aquecidas para 10 K, novamente aquecidas até 25 K e resfriadas de volta a 10 K. Os espectros de RPE mostram mudança significativa com a história térmica: O primeiro espectro a 10 K é largo e simétrico e a linha satura com a potência de microonda. O segundo espectro a 10 K é estreito, assimétrico e a razão de assimetria (A/B) varia com a potência da microonda. Discutimos dados de condutividade a.c. (9,4 GHz), largura de linha e intensidade para essa ressonância a 10 K e os mesmos dados quando a temperatura é elevada para 50 K. Comparamos os dados de RPE com medidas de condutividade d.c. e todos eles mostram uma transição de fase em torno de 220 K.

*Ressonância Magnética (RES) -
 09/06/94*

**RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA DE
 UM UNICO SPIN, MEDIDO COM
 MICROSCÓPIO DE TUNELAMENTO, NA
 SUPERFÍCIE Si/SiO_2 .**

MENEZES, R. P.; HELMAN, J. S.
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Uma superfície de Silício parcialmente oxidada contém centros paramagnéticos de spin. Na presença de um campo magnético constante, eles causam uma modulação na corrente do Microscópio de Tunelamento, com a frequência de Larmor. Portanto a microscopia de tunelamento oferece a possibilidade de se conhecer o entorno químico, magnético e topográfico de um unico

spin, através da detecção da corrente de tunelamento em uma região próxima ao centro de spin.

Apresentamos um modelo do centro paramagnético. Calculamos as funções de onda, o espectro de energia e os fatores giromagnéticos em função da direção do campo magnético aplicado.

Apartir destes dados calculamos o momento dipolar induzido por um centro paramagnético excitado. Ele tem componentes com a frequência de Larmor.

A corrente de tunelamento é modulada com a frequência de Larmor, devido a modulação da barreira de potencial causada pelo momento de dipolo.

**UMA NOVA INTERPRETAÇÃO PARA O
 ESPECTRO DE RPE DO $\text{NH}_4\text{Br} : \text{Cu}^{2+}$
 (BÁSICO)**

MAURO, E.

UEL

SANO, W.

IFUSP

Cristais de brometo de amônia dopados com Cu^{2+} e crescidos em soluções básicas ($\text{pH} \approx 8$) foram estudadas à 300K e 77K com RPE na banda X. Medidas da parte perpendicular dos espectros mostraram 16 linhas resolvidas (300K) e 19 linhas (77K), que foram interpretadas combinando 4 linhas hiperfinas e 13 linhas superhiperfinas. Nós obtivemos $A_{\perp} = (33 \pm 2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ (300K) e $A_{\perp} = (67 \pm 2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ (77K). Estes valores não são muito diferentes dos valores conhecidos para centros análogos no NH_4Cl e ND_4Cl , no entanto o parâmetro da interação superhiperfina, que nesta nova interpretação do espectro foi determinado como $A'_{\perp} = (47 \pm 2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ (300K e 77K), comparado com compostos de Cl é ao redor de cinco vezes maior, o que está na mesma razão das interações hiperfinas de átomos livres de Br e Cl.

**ESPECTRO PERPENDICULAR DE RPE DO
 $\text{NH}_4\text{Br} : \text{Cu}^{2+}$ (ÁCIDO): INTERAÇÕES
 HIPERFINA E SUPERHIPERFINA**

MAURO, E.

UEL

SANO, W.

IFUSP

O estudo da parte perpendicular do espectro de RPE do Cu^{2+} , caracterizado por um número variável de linhas quando dopado em brometo de amônia, foi agora realizado em cristais crescidos em solução ácida ($\text{pH} \approx 1,6$). As 19 linhas do espectro que foram observadas à 300K são interpretadas como em nosso estudo anterior do $\text{NH}_4\text{Br} : \text{Cu}^{2+}$ (básico). O novo parâmetro hiperfino é $A_{\perp} = (66 \pm 2) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ e o parâmetro superhiperfino $A'_{\perp} = (47 \pm 3) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$. O espectro à 77K tem 10 linhas e são interpretadas combinando 7 linhas superhiperfinas e 4 linhas hiperfinas. As interações hiperfina

e superhiperfina são da mesma ordem e responsáveis pelo espectro característico. A interação superhiperfina é ao redor de 4 vezes maior do que as encontradas para o centro análogo no NH_4Cl , aproximadamente a mesma razão observada nas interações hiperfinas entre os átomos livres de Br e Cl.

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FILMES FINOS DE FERRO

FERNANDES, A. A. R.; SANTOS, V. DOS; FERREIRA, C. L.; ALVES, R. M. P.

Instituto Militar de Engenharia

RAMOS, C.

Centro Atômico Bariloche

A ressonância ferromagnética tem sido utilizada como ferramenta para a investigação das propriedades magnéticas de filmes finos metálicos. Neste trabalho, medidas de ressonância ferromagnética (FMR) nas bandas X e Q e de magnetização (SQUID) foram realizadas em filmes finos de ferro crescidos por evaporação resistiva em substrato de vidro em uma câmara de vácuo trabalhando a 0,001 mtorr. O campo de anisotropia cristalina destes filmes foi determinado a partir da variação angular do campo de ressonância utilizando o modelo proposto por Suhl (1); os resultados obtidos estão em concordância com os apresentados na literatura (2-4). A magnetização total da amostra e a espessura dos filmes depositados foram determinados a partir da curva de magnetização, levantada com o auxílio de um SQUID no intervalo de -2 a 2 tesla. Com base nestes resultados, estão sendo crescidos filmes finos de ferro com diferentes espessuras, multicamadas de ferro e cromo e bicamadas de ferro-óxido de ferro-ferro por evaporação resistiva e deposição por feixe de elétrons com a finalidade de se estudar as possíveis mudanças das propriedades magnéticas do ferro por influência das camadas vizinhas.

(1) - H. Suhl, Phys. Rev. 97, 555 (1955).

(2) - F. Gerhardtter, Y. Li e K. Baberschke, Phys.Rev. B47, 11204 (1993).

(3) - C. Chappert et al., phys. rev B34, 3192 (1986).

(4) - M. Pomerantz et al., J.Appl.Phys 61, 3747 (1987).

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA EM COMPOSTOS DE GRAFITE INTERCALADO

PIRES, M. A.; ALMEIDA, W. M. M.; OLIVEIRA, E.

N. DE

UFG

Experimentos de Ressonância Paramagnética Eletrônica em grafite pirolítico altamente orientado *HOPG* e seus compostos de grafite intercalados *GIC*, tem sido largamente usados no estudo de várias propriedades destes materiais. Na grande maioria entretanto, estes experimentos estão relacionados à ressonância dos

elétrons de condução *CESR*, os quais são correlacionados as propriedades de transporte dos *GICs*, como por exemplo, a mobilidade, a resistividade planar, e a resistividade no eixo-c, etc. Este trabalho pretende mostrar que é possível obter informações da camada intercalante propriamente dita, via RPE de um íon magnético intercalado. Amostras de *HOPG* foram intercaladas com $AlCl_3$ e impureza magnética de Cu^{2+} . Os espectros de ressonância característicos do Cu^{2+} revelaram a existência de dois conjuntos de linhas hiperfinas caracterizadas por duas constantes hiperfinas distintas. Por comparação com os experimentos de RPE do íon Cu^{2+} em monocristal de $AlCl_3$, observamos que um dos sítios corresponde ao Cu^{2+} no $AlCl_3$ na forma cristalina, e o outro possivelmente corresponda ao sítio de alguma espécie gasosa Al_2Cl_6 produzida na fase de vapor da intercalação, caracterizando assim diferentes espécies intercaladas entre as camadas de carbono. Apresentaremos ainda, os primeiros resultados obtidos dos experimentos de RPE em compostos de grafite intercalados com $HgCl_2$ e $FeCl_3$.

A UTILIZAÇÃO DE RADICAIS CO_2^- COMO MARCADORES NA DOSIMETRIA E DATAÇÃO DE DENTES E OSSOS, POR RPE.

OLIVEIRA, L. M. DE; ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A Ressonância Paramagnética Eletrônica tem se destacado como uma das técnicas mais promissoras para a dosimetria de altas doses e para a datação geológica e arqueológica de materiais do Quaternário. Determinações de doses absorvidas em ossos e dentes atuais e fósseis (datação) tem sido realizadas, tendo como marcadores, centros paramagnéticos CO_2^- formados por irradiação na hidroxiapatita dos tecidos calcificados. A precisão na determinação da dose de irradiação acumulada e da idade da amostra dependem do conhecimento do espectro de RPE do marcador, da eficiência de sua produção pela radiação e da sua estabilidade térmica, à temperatura ambiente. Neste trabalho, estuda-se o espectro de RPE de grupos CO_2^- criados pela radiação natural, em esmalte de mamíferos e peixes fósseis, e a estabilidade térmica destas espécies. Medidas de RPE em 35 GHz mostram que o espectro da espécie CO_2^- com simetria ortorrômbica ($g_{xx}=2.0032$, $g_{zz}=2.0018$, $g_{yy}=1.9975$) encontra-se, em todas as amostras, superposto ao espectro de uma espécie CO_2^- isotrópica ($g=2.0007$), não observada em 9 GHz. Discute-se a influência desta espécie na determinação da dose acumulada e idades de materiais apatíticos. As cinéticas de redistribuição térmica dos elétrons desemparelhados nas espécies CO_2^- com simetrias ortorrômbica e axial foram simuladas como reações cinéticas de segunda ordem, indicando que o processo de redistribuição eletrônica é complexo. Sugestões de mecanismos de redistribuição

são apresentados no trabalho. As energias de ativação e vidas médias da espécie ortorrômbica são maiores que as da espécie isotrópica mostrando que este centro é o mais indicado para a datação de materiais apatíticos. A espécie CO_2^- , com simetria ortorrômbica e axial possuem, em esmaltes fósseis, vidas médias variáveis. Consequências destes resultados para a datação de dentes e ossos, por RPE, são discutidos no trabalho.

**INTERAÇÃO MAGNÉTICA EM
MONOCRISTAL DE
DICLOROBIS(1-FENIL-3,5-DIMETIL
PIRAZOL) Cu^{2+} [$\text{CuCl}_2(\text{fdmp})_2$].**

COSTA FILHO, A. J. DA; NASCIMENTO, O. R.

IFQSC-USP

MATTIOLI, M. P. D.

Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Um dos métodos mais efetivos para se estudar o acoplamento fraco de "superexchange" entre centros paramagnéticos é a observação do efeito emergente em multicomponentes da linha dos espectros de RPE. O método permite determinar a integral de "exchange" J e observar o aumento efetivo do valor de J com a temperatura. No caso de íons paramagnéticos em cristais as linhas de RPE são muito largas com anisotropia na largura comparável ao desdobramento da linha e, além disso, o fator g pode ser fortemente anisotrópico. Esse é o caso para sais de Cobre (II). Neste trabalho é estudado o composto Diclorobis(1-fenil-3,5-dimetilpirazol) Cu^{2+} , cuja estrutura cristalina é monoclinica com duas unidades moleculares por cela unitária. As medidas de RPE mostram um plano de simetria que apresenta apenas uma linha durante toda a variação angular do campo magnético, e os dois outros planos com duas, as quais colapsam em uma linha para determinadas direções do campo aplicado. A estrutura hiperfina esperada para o Cu(II) fica escondida na largura de linha devido à intensa interação de troca entre os dois Cu(II) vizinhos. Têm-se, pois, dois Cu(II) magneticamente não equivalentes por cela unitária. A análise do tensor g giromagnético e da variação do campo nas duas frequências de ressonância (bandas X e Q) permite determinarmos a interação magnética de troca.

**SIMULAÇÃO DE ESPECTROS DE RPE DE
MARCADORES DE SPIN**

GONÇALVES, W. M.; SARTORELLI, J. C.

IFUSP

Os marcadores de spin são radicais livres estáveis que se ligam quimicamente a sítios específicos de uma molécula de um sistema complexo. O espectro de RPE destes radicais livres nesses sistemas pode fornecer informações sobre o meio no qual está o radical. Os espectros de marcadores de spin dependem da mobilidade da molécula à qual estão associados, classificando-se em

movimentos *muito rápido, rápido, lento e imobilizado*, em comparação à resolução temporal do espectrômetro de RPE. Os movimentos moleculares são caracterizados pelo *tempo de correlação para difusão rotacional isotrópica* τ_R . Quando o movimento do radical é lento ($10^{-9} < \tau_R < 10^{-8}$ s) e imobilizado ($\tau_R < 10^{-8}$ s) os espectros se aproximam do espectro típico para polícristais e espectros de pó [1]. No presente trabalho apresentamos resultados da simulação de espectros de RPE para o marcador 5-SASL (5-doxil ácido esteárico) [2] para movimentos muito rápidos e imobilizado, utilizando-se um algoritmo de simulação de espectros de materiais amorfos por nós desenvolvido. No algoritmo a variação angular dos campos de absorção e probabilidades de transição são obtidas numericamente a partir da diagonalização do hamiltoniano efetivo de spin.

[1] Schneider, D.J. e Freed, J.H. *Calculating slow motional magnetic resonance spectra: a user's guide*, in **Biological Magnetic Resonance**, 8. Plenum Press Corp., New York (1989).

[2] Shida, Cláudio. *Estudo da interação de melatonina com membranas lipídicas*. Dissertação de mestrado. IFUSP (1993).

**ALGORITMO PARA A CONVERSÃO DE
CURVAS DIGITALIZADAS POR SCANNERS
DO FORMATO BMP PARA ARQUIVOS X Y
NO FORMATO ASCII.**

GONÇALVES, W. M.; SARTORELLI, J. C.

IFUSP

Este algoritmo foi inicialmente desenvolvido para abranger espectrômetros de ressonância paramagnética eletrônica que ainda não dispõem de um sistema de aquisição de dados informatizado, cujos espectros são registrados em papel. Estes espectros em papel podem ser digitalizados com um *scanner*, gerando um arquivo do tipo *mapa de bits - BMP*. O algoritmo EXTRACT extrai as coordenadas X Y de cada espectro gravando-as num arquivo *ASCII*, o que permite a sua manipulação numérica. Entretanto, o uso do algoritmo não se limita somente a espectros de RPE, mas pode ser usado para outros tipos de curvas registradas em papel. A seleção dos trechos da curva a serem convertidos é feita através de um *mouse*, e demais parâmetros para a conversão de escalas devem ser fornecidos pelo usuário. Será apresentada a listagem do algoritmo, escrito em linguagem C++, para o ambiente *Windows*.

ALGORITMO PARA A GERAÇÃO DE GRÁFICOS NO FORMATO POSTSCRIPT.

GONÇALVES, W. M.; SARTORELLI, J. C.
IFUSP

O *PostScript* é uma linguagem de programação especialmente projetada para a criação de texto e gráfico em uma página impressa, independente do tipo de dispositivo de saída. Com o uso de *Interpretadores PostScript*, os diversos comandos da linguagem são convertidos para um dispositivo específico, que pode ser uma unidade de vídeo ou uma impressora. Devido à sua flexibilidade, a linguagem tem se difundido como padrão internacional, havendo interpretadores disponíveis para microcomputadores, estações de trabalho e impressoras laser. Neste trabalho é apresentada uma rotina em FORTRAN-77 para a geração de gráficos na linguagem *PostScript* que permite ao usuário visualizar ou imprimir resultados rapidamente, sem a necessidade do uso de softwares gráficos independentes.

CARACTERIZAÇÃO DE POLÍMEROS CONDUTORES IÔNICOS UTILIZANDO A TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.

MELLO, N. C.; BONAGAMBA, T. J.; DONOSO, J. P.;
FRARE, P. L.

Instituto de Física e Química de São Carlos Universidade de São Paulo

Neste trabalho estudamos o processo de relaxação spin rede e o formato de linha nos polímeros condutores iônicos através da técnica de Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por Ressonância Magnética Nuclear. Os polímeros condutores iônicos são preparados com a solvatação de diferentes sais de metais alcalinos ($LiBF_4$ e $LiClO_4$) nos polímeros poli(óxido etileno) e poli(óxido propileno). Abaixo de sua temperatura de fusão (335K) estes polímeros apresentam-se como uma mistura de fases amorfas e cristalinas. As taxas de relaxação spin rede, estudadas nestes polímeros, estão associadas com a modulação da interação dipolar entre os núcleos 7Li e os prótons da cadeia poliméricas. Observou-se em altas temperaturas, baixos valores da taxa de relaxação spin rede, o mesmo acontecido para baixas temperaturas, enquanto que obteve-se um valor máximo da taxa de relaxação na região intermediária de temperaturas (que estaria associada com a temperatura de transição vítrea). No estudo de formato da linha de RMN, observamos um alargamento na região de baixas temperaturas, isto ocorrendo devido à interação dipolar $^7Li-^1H$, no regime de rede rígida. Concluímos desses estudos que o que o núcleo de 7Li apresenta maior mobilidade na região de altas temperaturas e que a interação dipolar dominante ocorre entre 7Li e 1H , enquanto que as interações $^7Li-^{19}F$ e $^7Li-^7Li$ apresentam-se em segundo e terceiro plano respectivamente.

DOSIMETRIA POR RPE DE FRUTAS TROPICAIS IRRADIADAS

JESUS, E. F. O. DE; LOPES, R. T.

COPPE-Universidade Federal do Rio de Janeiro

ROSSI, A. DA M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A Ressonância Paramagnética Eletrônica é uma das principais técnicas utilizadas para a identificação de radicais produzidos em alimentos pelas irradiações ionizantes. Dependendo do tipo do alimento irradiado, é possível estabelecer uma relação entre a dose absorvida e o número de centros paramagnéticos formados, conseguindo-se assim, realizar por RPE a dosimetria do alimento irradiado. Esta análise, entretanto, só é possível se a estabilidade dos centros formados for bem maior que a vida útil do alimento irradiado. No caso de frutas tropicais, a grande quantidade de água presente nas amostras é um fator de instabilidade destes radicais tornando suas vidas médias muito curtas, impossibilitando a dosimetria. Verificou-se, entretanto, que ao serem expostas a uma atmosfera seca, com baixo teor de umidade, amostras não irradiadas passaram a apresentar um centro paramagnético na região de $g = 2,0$ idêntico ao sinal gerado pela radiação. O crescimento deste sinal nas amostras não irradiadas, a medida que a água é removida dos tecidos, indica que a molécula de água tem papel importante não só na estabilidade dos radicais mas também na sua formação quando o alimento é irradiado. Neste trabalho, estuda-se a influência da umidade nos radicais usados para controle de dose por RPE, e procura-se estabelecer uma metodologia para a identificação de frutas tropicais irradiadas que permita analisar os radicais produzidos pela radiação separadamente dos centros produzidos por outros processos.

CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTRÔMETRO DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR. (RMN) DIDÁTICO

LISSO, P. R. O.; SILVA, E. G. DA; VIDOTO, E. L. G.; BONAGAMBA, T. J.; PANEPUCCI, H.

DFCM - IFQSC - USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) tem ganhado grande relevância não apenas pela possibilidade de produzir imagens de alta qualidade do interior do corpo humano sem dano a saúde, mas também como técnica espectroscópica. De fato, a espectroscopia por RMN permite obter importantes informações a respeito de detalhes da estrutura molecular, uma vez que consegue medir pequenas diferenças de energia. Por esta

razão é de extrema importância que estudantes de graduação e pós-graduação em Física tenham contato com esta técnica a níveis teórico e experimental. Neste sentido o presente trabalho propõe a construção de um espectrômetro de RMN didático para equipar o Laboratório de Ensino de Física Avançada do DFCM do IFQSC da USP. Este espectrômetro possibilitará o aprendizado de técnicas básicas em espectroscopia por RMN como medidas de tempos de relaxação longitudinal (T_1) e transversal (T_2). Também será possível medir o espectro de frequências de Larmor de amostras líquidas contendo Hidrogênio através da transformada de Fourier do sinal de FID obtido. A montagem do espectrômetro foi dividida nos seguintes módulos: - Módulo 1: fontes de alimentação do sistema, oscilador de RF, gerador de pulsos e modulador. - Módulo 2: amplificador de potência de RF. - Módulo 3: dupplexador, cabeçote e pré-amplificador de RF. - Módulo 4: atenuador, amplificador de RF, circuito que faz o batimento de RF, e os circuitos de amplificação e filtragem de áudio em fase e quadratura. Os sinais de fase e quadratura serão digitalizados em placa projetada especialmente para isto e os dados gerados serão adquiridos e analisados por um microcomputador PC. Esta mesma placa poderá gerar pulsos para modular a RF, fazendo as vezes do gerador de pulsos.

**AUTOMATIZAÇÃO DE UM
ESPECTRÔMETRO DE RESSONÂNCIA
PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA (RPE):
SISTEMA DE AQUISIÇÃO E
TRATAMENTO DO SINAL**

PESSÔA, E. F.
CBPF - CNPq

Com a necessidade de se automatizar um espectrômetro de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE), Varian modelo E-9, localizado no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas desenvolveu-se um sistema que permite aquisição e tratamento do sinal de RPE. O Sistema de Aquisição de Dados de RPE (EPRWIN) é executado sobre o ambiente Windows. Este ambiente permite a aquisição de espectros de RPE com uma boa qualidade gráfica possibilitando visualizar detalhes anteriormente não visíveis em sistemas desenvolvidos em interface DOS. Este sistema não depende do espectrômetro utilizado na aquisição, só necessitando de uma placa A/D de 12 bits para a digitalização do sinal de espectro e de uma placa de GPIB para controlar o Lock-In do Espectrômetro. Devido as grandes facilidades na utilização da plataforma Windows o sistema permite a execução de operações de manipulação de espectros, tais como: visualização simultânea de espectros, soma de espectros, cálculo de integral, cálculo de derivada,

superposição de dois espectros, zoom-in e zoom-out.

**RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA
ELETRÔNICA APLICADA AO ESTUDO DE
FERRO EM CAULINITA**

BERTOLINO, L. C.

Centro de Tecnologia Mineral/CNPq

ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq

O caulim é largamente usado na indústria do papel como cobertura e carga. A presença de ferro no caulim é um dos principais fatores responsáveis pela diminuição da qualidade do papel. A Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) tem sido utilizada na identificação dos sítios do ferro presente no mineral. O ferro em caulinitas pode ser encontrado sob duas formas distintas: substituindo o Al^{3+} na estrutura ou na forma de óxido e/ou hidróxido, ligados a superfície do mineral. Neste trabalho utilizou-se a RPE para avaliar a eficiência do processo industrial de extração de ferro na forma de óxidos e na forma de impurezas localizadas no interior da estrutura da caulinita. Industrialmente o caulim é submetido ao ataque químico com agente redutor, ditionito de sódio, para elevar o seu índice de alvura e grau de pureza. Os espectros de EPR das amostras de caulim procedentes do Morro do Felipe (Pará) mostram que parte do ferro presente na caulinita encontra-se substituindo o Al^{3+} . Curvas de variação do sinal de EPR em função do tempo de ataque com ditionito de sódio, indicam que o tratamento químico utilizado industrialmente é eficiente na redução do ferro, somente nos primeiros 30 minutos do ataque. Correlação entre o sinal de EPR e o índice de alvura das amostras indica que quando a extração do ferro estrutural atinge o seu limite a alvura se estabiliza.

**ESTUDO POR RPE DE Mn^{+2} EM SÍTIOS
DE Mg E Ca EM DOLOMITOS NATURAIS**

FRANCO, R. W. DE A.; PELEGRINI, F.

Universidade Federal de Goiás

ROSSI, A. M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

No processo natural de (re)cristalização de depósitos dolomíticos, o Mn participa da estrutura do mineral como impureza substitucional, ocupando posições de Ca e Mg. A razão de ocupação destes sítios pode ser determinada no espectro de RPE do Mn^{+2} . Esta razão de ocupação ($K = (Mn_{\text{emsítio de Mg}}^{+2}) / (Mn_{\text{emsítio de Ca}}^{+2})$) se relaciona com o processo de formação de dolomitas sedimentares, segundo modelo de Lumsden e Lloyd*. De

acordo com estes autores, amostras cristalizadas em associação à evaporitos possuem $K > 5$, enquanto amostras não evaporíticas teriam $K < 5$. El Ali et al** reafirma o modelo e procura relacionar K com a temperatura de cristalização e salinidade. Neste trabalho estuda-se o comportamento de K frente a aquecimentos até 700 C, em atmosferas inerte e comum, de 20 amostras de dolomitos sedimentares não associados a evaporitos, apresentando médio, baixo e nenhum metamorfismo. Verifica-se que a razão de ocupação não é alterada para aquecimentos até a temperatura de decomposição do mineral (400 C em atm comum e 500 C em atm inerte). Entre 400 e 700 C, K diminui até aproximadamente 2. Estes resultados sugerem que K pode ser usado como indicador de processos de cristalização somente para dolomitos não metamorfizados ou submetidos a metamorfismos fracos. Os valores de K obtidos nas amostras não aquecidas variam de 0,5 a 14. Considerando que todos os dolomitos estudados se cristalizam em ambientes não evaporíticos, tal resultado contesta o modelo proposto por Lumsden e Lloyd.

* Lumsden, D. N., Lloyd, R. V., 1984. *Geochim. et Cosm. Acta*. Vol. 48, pp 1861-1865.

** El Ali, A., Barbin, V., Calas, G., Cervelle, B., Ramseier, K. and Bouroulec, J., 1993. *Chem. Geol.*, 104: 189-202.

ANÁLISE POR RPE DE FRUTAS TROPICAIS IRRADIADAS

JESUS, E. F. O. DE; LOPES, R. T.

COPPE-Universidade Federal do Rio de Janeiro

ROSSI, A. DA M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

A Ressonância Paramagnética Eletrônica é uma das principais técnicas utilizadas para a identificação de radicais produzidos em alimentos pelas irradiações ionizantes. Dependendo do tipo do alimento irradiado, é possível estabelecer uma relação entre a dose absorvida e o número de centros paramagnéticos formados, conseguindo-se assim, realizar por RPE a dosimetria do alimento irradiado. Esta análise, entretanto, só é possível se a estabilidade dos centros formados for bem maior que a vida útil do alimento irradiado. No caso de frutas tropicais, a grande quantidade de água presente nas amostras é um fator de instabilidade destes radicais tornando suas vidas médias muito curtas, impossibilitando a dosimetria. Verificou-se, entretanto, que ao serem expostas a uma atmosfera seca, com baixo teor de umidade, amostras não irradiadas passaram a apresentar um centro paramagnético na região de $g = 2,0$ idêntico ao sinal gerado pela radiação. O crescimento deste sinal nas amostras não irradiadas, a medida que a água é removida dos tecidos, indica que a molécula de água tem papel importante não só na estabilidade dos radicais mas também na sua formação quando o alimento é irradiado. Neste trabalho, estuda-se a influencia da

umidade nos radicais usados para controle de dose por RPE, e procura-se estabelecer uma metodologia para a identificação de frutas tropicais irradiadas que permita analisar os radicais produzidos pela radiação separadamente dos centros produzidos por outros processos.

Dosimetria por Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) de Dentes de Vítimas do Acidente Radiológico de Goiânia

ROSSI, A. DA M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

WASCHECK, C. C.

Fundação Leide das Neves

JESUS, E. F. O. DE

COPPE-UFRJ

VUGMAN, N. V.

Instituto de Física, UFRJ

A RPE tem se destacado nos últimos anos como uma das técnicas mais promissoras para a determinação de doses de radiação absorvidas em acidentes radiológicos. Ossos e dentes são os materiais que apresentam maiores potencialidades para dosimetria por RPE. Os marcadores de dose - centros paramagnéticos criados pela radiação na hidroxiapatita - possuem grande estabilidade térmica a temperatura ambiente (vida média de 10^7 anos), o que possibilita a determinação da dose acumulada, mesmo muitos anos após o acidente. Os equipamentos de RPE atuais são capazes de determinar doses absorvidas em esmalte a partir de 0,1 Gy. Neste trabalho são apresentados os primeiros resultados da dosimetria por RPE de esmalte e dentina de dentes de vítimas (grupo I, o mais exposto a radiação) do acidente radiológico de Goiânia. A dose acumulada (DA) foram obtidas através do método das doses aditivas, sendo as amostras irradiadas com uma fonte de cobalto-60 do Instituto de Radioproteção e Dosimetria da CNEN (RJ). As irradiações foram realizadas com uma precisão de 0,5%. Os resultados obtidos por RPE indicam que as doses são bem mais elevadas que as obtidas pela dosimetria citogenética. A interpretação dos resultados e a discussão sobre as discrepâncias entre as doses obtidas pelas duas técnicas são discutidas no trabalho.

INFLUÊNCIA DE MOLÉCULAS DE ÁGUA NA ESTABILIZAÇÃO DE RADICAIS CO_2^- PRODUZIDOS POR RADIAÇÃO γ EM ARAGONITAS MINERAIS E DE ORIGEM BIOLÓGICA.

SCHRAMM, D. U. DA S.; ROSSI, A. M.

CBPF/CNPq

Centros paramagnéticos CO_2^- com simetria ortorrômbica e isotrópica ($g = 2,0007$) produzidos, pela radiação γ e elétrons, em aragonitas de origem biológica (moluscos, corais e algas), possuem estabilidade para

serem utilizados na dosimetria e na datação por RPE de amostras de pelo menos 10^3 anos[1]. No entanto, tem-se observado que a vida média destes centros, a temperatura ambiente, pode variar muito de uma amostra para outra (10^3 ; τ ; 10^7 anos)[1,2]. As razões desta grande variação da vida média destes defeitos não são de todo conhecidas. Estudos de RPE com monocristais de aragonita mineral e com 30 amostras de aragonitas de origem biológica de procedências e espécies diferentes, irradiadas e aquecidas e reirradiadas, indicam que a espécie CO^-_2 isotrópica é estabilizada por moléculas de água de cristalização, existentes na estrutura do mineral. A espécie CO^-_2 , com simetria ortorrômbica ($g_x = 2.0018$, $g_y = 1.9973$, $g_z = 2.0032$), não é associada à águas de cristalização. Conseqüências deste resultado na datação, por RPE, de aragonitas de origem mineral e biológica são discutidas. [1] Schramm, D.U. - Tese de Mestrado/CBPF (1994), [2] Molodkov, A. - Appl. Radiat. and Isot. Vol. 44 (1993), Nos. 1 - 2, pág. 145.

RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA EM ELETRÓLITOS POLIMÉRICOS.

SOUZA, P. H. DE; DONOSO, J. P.; MAGON, C. J.
IFQSC - USP

Os complexos poliméricos sólidos formados entre um polieter e um sal constituem eficientes condutores iônicos. Com o objetivo de estudar as diferenças na ordenação do cátion e sua dinâmica estamos realizando um estudo de RPE nos complexos entre perclorato de lítio dopado com sais paramagnéticos e os polímeros Poli(óxido de etileno) - POE, Diésterato de Polietileno Glicol - DPEG e Poli(óxido de propileno) - PPO. Os complexos obtidos com este último polímero são amorfos, enquanto que os formados com POE e DPEG são semicristalinos em geral. Espectros de RPE foram obtidos em banda X a temperatura ambiente nos complexos: (1)POE₆ LiCl₄, (2)PPO₆ LiClO₄ e (3)DPEG₁₀ LiClO₄ dopados com 1% de Mn(ClO₄)₂. Todos os espectros mostraram a estrutura hiperfina de seis linhas do Mn²⁺, cujo núcleo ⁵⁵Mn possui I=5/2. Estes espectros aparecem centrados em g=2.00 como corresponde para um íon Mn²⁺ num campo cristalino fraco. Nossos resultados preliminares mostram que os valores do parâmetro hiperfino, A, variam entre $(46.7 \pm 4.0) \times 10^{-4}$ cm⁻¹ (50 G) no sistema (1) e $(52.9 \pm 4.0) \times 10^{-4}$ cm⁻¹ (56.7 G) nos sistemas (2) e (3). Estes valores são menores que os obtidos para íons Mn²⁺ em solução aquosa, A=89.0x10⁻⁴ cm⁻¹. Os desdobramentos hiperfinos do ⁵⁵Mn em cristais variam entre 50×10^{-4} cm⁻¹ de acordo com a covalência do ligante. Uma variação desta ordem não é esperada neste caso pois não existe uma diferença apreciável na covalência destes diferentes complexos poliméricos. O que pode ocorrer são mudanças na simetria da complexação do cátion.

ANALYSIS OF ³⁵Cl NUCLEAR QUADRUPOLE RESONANCE PARAMETERS IN ALLOYS OF THE MOLECULAR CRYSTALS p-DICHLOROBENZENE (pDCB) AND p-DIBROMOBENZENE (pDBB).

BUSSANDRI, A. P.; ZURIAGA, M. J.; MARTÍN, C. A.
FAMAF - UNC, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba,
Argentina
PALLAS, M. T. C.; DIARTE, M. A. C.
Depto. de Mineralogía y Depósitos Minerales, Facultad de
Geología, Universidad de Barcelona, 08028 Barcelona,
España.

Alloys of molecular crystals is an active field of research with interesting technological applications. Particularly, it poses as an attractive problem to determine the responsible microscopic interactions that control phase transition temperatures. Among these, pDCB_{1-x}pDBB_x alloys present the fact that their melting and solidification temperature are in the neighborhood of room temperature, making it possible to use it as a heat reservoir for heating-cooling systems. The phase diagram for p-DCB_{1-x}pDBB_x alloys have been determined by means of RX and DTA. In this work we want to report ³⁵Cl NQR room temperature lineshape measurements and analyses over the whole concentration interval. The measurements show a concentration dependance on the lineshape, the linewidth and the central position of the absorption line. These dependences are successfully explained by means of a statistical substitution of pDCB molecules by pDBB molecules in a pDCB crystal lattice. Partial financial support provided by CONICET, CONICOR, SECYTECOR and SECYTUNC is gratefully acknowledged.

IMÁGENES POR RESONANCIA CUADRUPOLAR NUCLEAR

PUSIOL, D. J.; ROBERT, H. R.
Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba -
Argentina

En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método de imágenes, especialmente diseñado para ser utilizado en materiales sólidos, los cuales contengan núcleos cuádrupolares. El método de imágenes en el sistema rotante tiene la ventaja de que la codificación espacial se realiza sin destruir la información espectroscópica. El espectro de la Resonancia Cuádrupolar es sensible a variaciones de temperatura de la muestra, campos magnéticos y/o eléctricos, composición isotópica, transiciones de fase polimórficas y a deformaciones del cristal conteniendo la muestra. Diferentes variantes y algoritmos de reconstrucción desarrollados en los Laboratorios de Córdoba y Ulm se presentan. también posibles aplicaciones a usos médicos e industriales se discuten.

IMÁGENES DE DISTRIBUCIÓN DE TENSIONES Y PRESIONES EN SÓLIDOS UTILIZANDO RESONANCIA CUADRUPOLAR NUCLEAR

ROBERT, H.; PUSIOL, D. J.

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba - Argentina

NICKEL, P.; KIMMICH, R.

Sektion Kernresonanzspektroskopie, Universität Ulm

Los esfuerzos mecánicos y las presiones ejercidas sobre una muestra sólida que contenga núcleos cuadrupolares puede afectar los parámetros de la Resonancia Cuadrupolar pura (RCN) como son la frecuencia de resonancia, el ancho de línea y sus momentos. Se describe en este trabajo una técnica que permite realizar mediciones espacialmente resueltas de los parámetros de la RCN. Este método, en el que se utilizan bobinas superficiales, puede utilizarse para hacer mediciones de esas cantidades en objetos sólidos. La técnica de imágenes por RCN en el sistema rotante (ρ NQRI) hace uso de gradientes de campos de radio frecuencia para obtener resolución en profundidad. Se muestran experimentos piloto para la determinación de la distribución espacial de esfuerzos y presiones de deformación. Se demuestra así que la técnica es apta para mediciones remotas de presión y esfuerzos.

QUANTUM ECHOES IN SPIN DIFFUSION

PASTAWSKI, H. M.; LEVSTEIN, P. R.

LaNAIS de RMN (CONICET) - FaMAF, Universidad Nacional de Córdoba

Since a molecule in a crystal may be considered as a mesoscopic system of nuclear spins, one might expect a spin dynamics with characteristic interference phenomena revealing that spin diffusion is actually a quantum evolution. In NMR the polarization in a particular 1H can be measured by using a rare ^{13}C as a local probe [1]. We show the existence of quantum beats in the local magnetization of several molecules containing different numbers of interacting 1H spins, provided that the intermolecular and spin-lattice interactions are weaker than the intramolecular ones. For the case of a ferrocene single crystal with r.f. field parallel to the five-fold symmetry axis of the C_5H_5 rings we predict a series of magnetization echoes (the first at about 540 μs) induced by interferences of 1H 1H magnetic dipolar (through space) interactions in a ring. [1] S. Zhang, B. Meier and R.R. Ernst, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2149 (1992).

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DO CAMPO DE UM MAGNETO SUPERCONDUTOR DO TIPO PARES SEPARADOS PELO MÉTODO DAS SÉRIES DE POTÊNCIAS

BIANCHI, I.

Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá - FEG/UNESP

SHIGUE, C. Y.; BALDAN, C. A.

Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR/FAENQUIL

A homogeneidade é o parâmetro que mede o fator de qualidade do campo magnético para aplicação em RMN. Para se otimizá-la, é necessário o desenvolvimento de métodos precisos para se determinar como as componentes de erro do campo variam no espaço. Com o propósito de se determinar a equação matemática que melhor descreve o comportamento espacial do campo gerado por um magneto supercondutor de 7T do tipo pares separados, usando-se sensor Hall, foram feitas medidas da componente axial em vários pontos situados na sua região interior. As dimensões do magneto são: diâmetro interno 188 mm, diâmetro externo 293 mm e 220 mm de comprimento. Usando-se o métodos dos mínimos quadrados, os valores medidos são ajustados à várias funções polinomiais das variáveis espaciais em coordenadas retangulares (x,y,z) e das combinações dos produtos e/ou diferenças entre elas, e os resultados comparados entre si.

EPR Q-BAND PAIR INTERACTION STUDY IN IRRADIATED SODIUM NITROPRUSSIDE SINGLE CRYSTALS

COSTA, A. R. H.; VUGMAN, N. V.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Sodium nitroprusside $Na_2[Fe(CN)_5NO].2H_2O$ is a diamagnetic salt. Divalent iron ion is in a low spin $3d^6$ state. Ionizing radiation reduces the complex and Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopy reveals the presence of an unpaired electron in adz^2 antibonding molecular orbital, interacting with the NO nitrogen nucleus, giving rise to intense and anisotropic hyperfine triplets. Single crystal studies have been extensively performed on this system. The angle between the two magnetically non equivalent molecules per unit cell has been determined to be $102^\circ 15'$ [J. Danon et al., *J. Chem. Phys.* **41**, 3651, (1964)]. Higher dose radiation, on the other hand, produces neighboring paramagnetic complexes. Their interaction gives rise to pairs of satellite quintets, with an hyperfine spacing equal to the half of the former triplet lines. This interaction has been attributed to a pure magnetic dipole pair interaction [D. A. C. McNeil et al., *Mol. Phys.*, 1966]. In the present work we measure this pair interaction in irradiated single crystals, using Q-band EPR (35 GHz). Several interacting pairs are observed. Angular variation studies allow the spacial determination

of its principal axes and shine some additional lights on the nature of the magnetic interaction.

ESTABILIZAÇÃO DE RADICAIS CO_2^- EM HIDROXIAPATITA DE TECIDOS CALCIFICADOS.

VUGMAN, N. V.

UFRJ

Rossi, A. M.

CBPF/CNPq

Centros paramagnéticos CO_2^- com simetria axial, ortorrômbica e isotrópica são criados pelas radiações ionizantes em carbohidroxiapatitas de ossos e dentes. Estes defeitos possuem grande estabilidade térmica à temperatura ambiente e podem, por isto, ser utilizados como marcadores de dose e tempo geológico. Em materiais carbonáticos a espécie dosimétrica, CO_2^- isotrópica ($g=2,0007$), é provavelmente estabilizada por moléculas de água de cristalização¹. Supõe-se que a vida média destes defeitos pode variar com o teor de humidade da amostra. Neste trabalho estuda-se, por RPE e ENDOR, a associação de moléculas de água com grupos CO_2^- produzidos por irradiação na hidroxiapatita de esmaltes fósseis, com idades variáveis entre 300.000 e 1.000.000 de anos. Estes grupos ocupam sítios de fosfatos estando a direção O - O paralela ao eixo principal de simetria da hidroxiapatita. Em amostras de animais marinhos, observa-se que o elétron desemparelhado interage com prótons pertencentes à moléculas de água localizadas nos sítios de OH^- mais próximos destes radicais (4.4 Å). Em amostras de mamíferos não se observa a presença de moléculas de água nos sítios dos primeiros vizinhos dos grupos CO_2^- . Os sítios de hidroxilas mais próximas dos grupos CO_2^- são ocupados por vacâncias. Os prótons são observados somente a 9 Å dos grupos CO_2^- . Estes resultados sugerem que moléculas de água não são determinantes para a estabilização de grupos CO_2^- formados por irradiação em ossos e dentes. ¹ Schramm, D.U., Rossi, A.M.-A ser apresentado no XVII ENFMC-Caxambu(1994).

PREDIÇÃO LINEAR: UMA FERRAMENTA ÚTIL EM RMN.

MAGON, C. J.; TANNUS, A.

IFQSC-USP

Neste trabalho trataremos especificamente do problema do "tempo morto" ^a na análise dos sinais de FID em experimentos de RMN. Este "tempo morto" representa um atraso entre o término do pulso de $\pi/2$ e o início da aquisição do sinal. Na RMN de alta resolução este "tempo morto" é normalmente insignificante se comparado com o tempo total de aquisição, portanto seus efeitos no espectro são pequenos e podem ser corrigidos computacionalmente. Por outro lado, este problema não é trivial no caso da RMN de linhas largas. O atraso

na aquisição do sinal gera a indeterminação da fase de suas diferentes componentes espectrais, o que impossibilita a separação dos modos de absorção e dispersão do espectro.

Apresentaremos os métodos convencionais para resolver este problema e proporemos uma solução mais eficiente que é baseada no método da "predição linear"^b. Através deste método é possível reconstruir a extensão analítica do sinal de FID durante o "tempo morto". O método é muito mais poderoso do que uma simples extrapolação linear e é especialmente adequado ao tratamento de sinais com características temporais oscilatórias, não necessariamente periódicas. Desde que adequadamente implementado, este método é computacionalmente eficiente. Em geral o FID pode ser reconstruído em menos de 10 segundos em um microcomputador PC-386-SX com co-processador aritmético.

^aFukushima, E.; Roeder, S. B. W. "Experimental Pulse NMR" Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1981.

^bPress, W.H. et al "Numerical Recipes in C" Cambridge University Press, 2ed., 1992

Ressonância Magnética Nuclear (RES) - 10/06/94

ELIMINAÇÃO DE BANDAS LATERAIS EM ESPECTROS DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

VIDOTO, E. A.; BONAGAMBA, T. J.; PANEPUCCI, H. C.; VIDOTO, L. G.; SILVA, J. G. DA
IFQSC-USP-São Carlos

Em experimentos de Espectroscopia de Alta Resolução em Sólidos por RMN, o Objetivo principal é observar os diferentes deslocamentos químicos isotrópicos apresentados pelos núcleos atômicos em observação. Porém, esta observação é dificultada pelas contribuições anisotrópicas das interações que os spin nucleares sofrem, tais como deslocamento químico anisotrópico, interação dipolar magnética e interação quadrupolar elétrica. Para eliminar esse problema, utiliza-se a técnica de rotação da amostra em torno do ângulo mágico (RAM). No entanto, quando não efetuamos a rotação da amostra com a frequência teoricamente prevista, surgem bandas laterais (BL) no espectro, as quais são réplicas das linhas isotrópicas e dificultam drasticamente a interpretação do espectro. Neste trabalho, propomos a eliminação das bandas laterais baseando-se no fato de que a posição das mesmas dependem da frequência de rotação enquanto que as linhas isotrópicas se mantêm inalteradas. Desta forma, realizamos o processo de promediação de sinal de RMN, fazendo RAM

com frequência variável. Assim, no final da promedição os sinais isotrópicos somam-se continuamente enquanto que as BL somam-se ao acaso. A variação da frequência de rotação é feita mediante uma válvula de agulha à qual é adaptado um motor de passo. Esta último é controlado por um microcomputador ou por um sistema de comando digital. Aplicamos a técnica de rotação variável ao deslocamento químico do núcleo raro ^{13}C e à interação quadrupolar do ^{79}Br .

**DESENVOLVIMENTO DA TÉCNICA DE
DESACOPLAMENTO HETERONUCLEAR
EM BANDA LARGA PARA
ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO
EM SÓLIDOS POR RESSONÂNCIA
MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN).**

SILVA, E. G. DA; BONAGAMBA, T. J.; VIDOTO, E.
L. G.; PANEPUCCI, H.

IFQSC - USP

Na espectroscopia de alta resolução em sólidos por RMN com núcleos raros (^{13}C), a interação dipolar magnética heteronuclear com núcleos abundantes (^1H) pode provocar alargamentos de linha de até dezenas de KHz. A técnica de dupla ressonância denominada desacoplamento heteronuclear simples (DHS), que consiste da aplicação de radio-frequência (RF) de forma contínua durante a aquisição do sinal do núcleo raro, é utilizada para eliminar este problema. No entanto, devido ao fato do núcleo abundante apresentar diversas frequências de Larmor provenientes dos efeitos da interação dipolar magnética homonuclear (alargamentos de dezenas de KHz) e de seu próprio deslocamento químico isotrópico (alargamentos de KHz), a técnica DHS é pouco eficiente. Para melhorar a eficiência do desacoplamento, o que significa satisfazer a condição de ressonância para todos os núcleos abundantes que apresentam frequências de Larmor diferentes, torna-se necessária a utilização das técnicas de desacoplamento heteronuclear em banda larga (DBL), tais como: noise decoupling, square wave decoupling e também das sequências de pulsos compostos WALTZ-16 e MLEV-64. Para isto, desenvolvemos a instrumentação necessária para a implementação e utilização em nossos experimentos das diversas técnicas DBL.

**APLICAÇÃO DA ESPECTROSCOPIA DE
ALTA RESOLUÇÃO EM SÓLIDOS POR
RMN DE ^{13}C À ANÁLISE DOS PROCESSOS
DE REMOÇÃO DO DIRECIONADOR DE
ZEÓLITAS BETA.**

FREITAS, J. C. C. DE; BONAGAMBA, T. J.;
PANEPUCCI, H.

IFQSC/USP

CARVALHO, M. W. N. C.; CARDOSO, D.

DEQ/UFSCar

A zeólita beta é a única a ter um sistema tridimensional de canais com 12 tetraedros com intersecção quiral, sendo dois sistemas de canais lineares e um tortuoso. Assim como as demais zeólitas com alto teor de sílica, é um catalisador importante devido à sua potencial estabilidade térmica, hidrotérmica e frente a tratamentos ácidos, elevada força ácida e particular hidrofobicidade. Dentre suas várias aplicações catalíticas, destacam-se a transalquilação e desproporcionamento de aromáticos, hidroisomerização e craqueamento de parafinas. Neste trabalho procuramos observar a influência de calcinações e trocas iônicas sucessivas na eficiência da retirada do direcionador (Tetra-Etil-Amônio) de uma zeólita beta industrial. Utilizamos as técnicas de Rotação em torno do Ângulo Mágico (MAS) e Desacoplamento (DEC) para obtermos os espectros RMN de alta resolução de ^{13}C das amostras analisadas; através de tais espectros identificamos o direcionador das amostras sintetizadas em laboratório e das comerciais, comparando-os com os espectros do sal de Tetra-Etil-Amônio. Além disso, pudemos acompanhar os processos de retirada de tal direcionador, obtendo os espectros de cada fase dos tratamentos físico-químicos envolvidos e avaliando a eficiência de cada sequência através da quantificação das intensidades das linhas observadas.

**ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO
EM SÓLIDOS POR RESSONÂNCIA
MAGNÉTICA NUCLEAR APLICADA A
POLIANILINA**

GIOTTO, M. V.; BONAGAMBA, T. J.; PANEPUCCI,
H.; MATTOSO, L. H. C.; FARIA, R. M.

*Instituto de Física e Química de São Carlos Universidade
de São Paulo*

Este trabalho consiste no estudo por RMN de ^{13}C do processo de dopagem por protonação ácida da polianilina. As polianilinas formam uma classe de polímeros condutores eletrônicos que podem existir em três estados diferentes de oxidação: o estado no qual o polímero está totalmente reduzido (leucoemeraldina), 50% oxidado (emeraldina) e totalmente oxidado (pernigranilina). Trabalhamos com a polianilina no estado emeraldina. A síntese foi realizada a partir da polimerização oxidativa da anilina, utilizando o peroxodissulfato de amônia em meio aquoso ácido (HCl 1.0M). O polímero é obtido no estado emeraldina dopada, que possui radicais cátions delocalizados na estrutura. O polímero com diferentes graus de dopagens é obtido partindo do estado emeraldina base (desdopado em pH=10), por imersão das amostras em solução de HCl com pH controlado, o que promove um aumento da condutividade em até 10 ordens de grandeza, podendo chegar a 5 S/cm (em pH=0). Utilizamos a técnica de espectroscopia de alta resolução em sólidos por RMN, utilizando desa-

coplamento em alta potência e rotação da amostra em torno do ângulo mágico, afim de se estudar as alterações nos espectros de ^{13}C , produzidas pelo processo de dopagem da polianilina com HCl. Também estão sendo realizadas medidas de condutividade elétrica dc e de ressonância paramagnética eletrônica com o propósito de obter informações complementares sobre o mecanismo de condução eletrônica na polianilina dopada.

ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO EM SÓLIDOS POR RMN DE ^{29}Si E ^{27}Al APLICADA AO ESTUDO DA DESALUMINAÇÃO DE ZEÓLITAS Y.
FREITAS, J. C. DE; BONAGAMBA, T. J.; PANEUCCI, H.
IFQSC/USP
VITOR SOBRINHO, E.; CARDOSO, D.
DEQ/UFSCar

A zeólita Y (faujasita com $\text{Si}/\text{Al} > 1.5$) se constitui num dos mais utilizados catalisadores em reações de craqueamento; para ser utilizada com esse fim, entretanto, tal zeólita deve apresentar condições de alta estabilidade, obtidas a partir de um conjunto de tratamentos físico-químicos conhecido pelo nome de "ultraestabilização", que envolve trocas iônicas, tratamentos hidrotérmicos e lixiviações em meio ácido. As zeólitas estudadas neste trabalho constituem as várias etapas do processo de desaluminação cíclica, partindo da forma amoniacal (NH_4Y), com $\text{Si}/\text{Al} = 2.7$, até alcançar razões Si/Al bastante elevadas (da ordem de 35). A espectroscopia de alta resolução em sólidos por RMN permite um acompanhamento detalhado do processo de desaluminação. Os espectros de RMN de ^{29}Si obtidos com Rotação em torno do Ângulo Mágico (MAS) identificaram os vários tipos de átomos de silício nas amostras, de acordo com a quantidade de átomos de alumínio na segunda esfera de coordenação; a partir das intensidades (áreas) de tais linhas foram calculadas as relações Si/Al estruturais de cada amostra, mostrando a eficiência do processo. O uso simultâneo das técnicas MAS e Polarização Cruzada (CP) permitiu a observação da ocorrência de defeitos estruturais que surgiram no decorrer dos tratamentos, através do aumento de intensidade de algumas linhas particulares do espectro. Os espectros RMN de ^{27}Al propiciaram um acompanhamento similar, já que os átomos de alumínio intra e extra-estruturais aparecem em deslocamentos químicos diferentes; entretanto tais espectros são difíceis de serem obtidos e analisados quando se trabalha com baixo campo magnético, em virtude do alargamento quadrupolar de segunda ordem das linhas observadas.

DYNAMIC IMAGING APPROACH FOR 3-D PREFERENTIAL FLOW WITHIN STRATIFIED SOIL SAMPLES.

TANNÚS, A.; PANEUCCI, H.

IFQSC-USP

POSADAS, A. D.

CNPDIA-EMBRAPA

CRESTANA, S.

CNPDIA-EMBRAPA e IFQSC-USP

Here we describe a new NMR imaging approach to investigate the dynamics of the soil "fingering" phenomenon. To study the "fingering" dynamics a fast experiment was performed to follow only the water front (*no image reconstruction*), constructed by curves that resembles the wetting profile in vertical slices of a soil sample. A cubic $15 \times 15 \times 15 \text{ cm}^3$ double-layer sand column simulates the stratified soil. Spin-echo signals with phase encoding along vertical axis (gravitational direction) were acquired, but with phase encoding gradient off, giving 16 acquisitions of 7 transverse slices in a 3 minutes experiment. After suitable treatment, the water front and the horizontal distribution at each measured time of the water infiltration was obtained. Normalizing the signal intensities to the soil column dimensions and using computational graphics resources it was possible to quantify the number of fingers and their spatial and temporal variability. The column was also imaged in a 500 Gauss NMR tomograph under conventional SE methodology. Coronal, transverse and sagittal images of the column were acquired under water steady-state flow providing three-dimensional information regarding the number of fingers, their sizes and diameters, to be compared to the dynamic images. The results to be shown elects this approach of Magnetic Resonance Imaging as a valuable tool for non-invasive study of the dynamics of soil "fingering" and other fast changing phenomena.

TÉCNICAS DE AQUISIÇÃO RÁPIDA EM IMAGENS POR RMN.

FOERSTER, B.; TANNÚS, A.; PANEUCCI, H.

IFQSC-USP

Neste trabalho apresentamos e comparamos diferentes técnicas de tomografia bidimensional por RMN implementados num sistema de tomografia de campo magnético ultrabaixo (0.05T). A partir da seqüência convencional "Spin Echo" (SE), utilizada rotineiramente, implementamos a seqüência "Gradient Recalled Echo" (GRE) e duas seqüências que utilizam o princípio de Steady-State Free Precession (SSFP), sendo "Fast Low Angle Shot" (FLASH)^a e "Fast Acquisition Double Echo" (FADE)^{b,c}. Com as seqüências de SSFP conseguimos diminuir drasticamente a duração de um exame de tomografia convencional (seqüência SE). A seqüência FADE ainda permite adquirir duas imagens com con-

trastes claramente diferentes sem aumentar significativamente a duração do exame. Desenvolvemos procedimentos de calibração, indispensáveis para as técnicas de SSFP que também melhoraram a relação sinal ruído de 15 por cento na técnica SE. Analisamos teórica e experimentalmente o comportamento do contraste das seqüências apresentadas. Fizemos ainda uma série de imagens da cabeça de um voluntário com as diferentes seqüências e sugerimos algumas combinações dos parâmetros (protocolos) como tempo de repetição, tempo ao eco e ângulo de excitação. Um destes protocolos está sendo testado em casos clínicos para comparar a utilidade das seqüências apresentadas no diagnóstico médico. Com este trabalho ganhamos uma experiência na utilização de técnicas rápidas indispensável para a elaboração de uma metodologia para obter imagens tridimensionais.

^aP. van der Muelen, J. P. Groen and J. J. M. Cuppen: "Very Fast MR Imaging by Field Echoes and Small Angle Excitation", *Magn. Reson. Imaging* 3, 297 (1985)

^bT.W. Redpath and R.A. Jones: "FADE - A New Fast Imaging Sequence", *Magn. Reson. Med.* 6, 224, (1988)

^cS.Y. Lee and Z.H. Cho: "Fast SSFP Gradient Echo Sequence for Simultaneous Acquisitions of FID and Echo Signals", *Magn. Reson. Med.* 8, 142, (1988)

NMR RELAXATION, NOE AND ESR STUDIES OF PAPAVERINE INCORPORATED INTO IONIC MICELLES.

YUSHMANOV, V. E.; IMASATO, H.; PERUSSI, J. R.; TABAK, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

The localization of papaverine (PAV) in micelles of zwitterionic N-hexadecyl-N,N-dimethyl-3-ammonio-1-propanesulfonate (HPS), cationic cetyltrimethylammonium chloride (CTAC) and anionic sodium dodecylsulfate (SDS) in D₂O was studied by ¹H NMR and ESR. Non-selective, selective and double-selective T₁, and steady-state, truncated and transient NOE were measured. In the presence of hydrophobic spin-probes 5-doxyl- and 12-doxyl-stearic acids, proton T₁ and ESR spectra were obtained. PAV, surfactants and spin-probes are characterized by restricted anisotropic motion in micelles. The rotational correlation time of doxyl fragment was in the range of 0.2 to 0.5 ns. Binding of PAV to micelles decreases the mobility of both probes suggesting the localization of PAV inside the hydrophobic part of micelles near the micelle-water interface. According to the NOE data, the methoxy groups of PAV are located in the vicinity of nitrogen atom in CTAC and HPS micelles, the methoxy groups of the PAV heterocycle being immersed slightly deeper inside the micelle. The T₁ relaxation enhancements by two different spin-probes show that the H5 and methoxy substituents of the PAV heterocycle are in close proximity to the alpha-methylenes of acyl chains in all types of micelles, whereas the H3 and H12 are the most

distant from the alpha-methylenes. No significant differences were found for the protonated and neutral PAV in SDS micelles at pD 4.9 and 11.2. These data show that the geometry of PAV-micelle complex is practically independent of the PAV charge and surfactant head-group, and that difference in binding constants is due to the electrostatic interaction of PAV with charged headgroups of surfactants.

Ressonância Quadrupolar Nuclear, RMN (RES) - 10/06/94

ESTUDO DO PROCESSO DE TROCA POR PRÓTONS EM LiNbO₃ EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA E DAS DIFERENTES FONTES PROTÔNICAS

PACOBAYBA, L. H.; SOUZA, R. E. DE; ENGELBERG, M.; NASCIMENTO, G. C. DO

Grupo de espect. e imagens por RMN - Dep. de Física - UFPE

BONAGAMBA, T.

Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

A troca por prótons em LiNbO₃ é um processo de grande interesse tecnológico visto que seu domínio permitiria a confecção de vários tipos de dispositivos óticos com alta repetibilidade, baixo custo e substancial qualidade ótica. Desta forma, devido a alta sensibilidade dos prótons, à RMN, estes núcleos são as sondas mais adequadas e disponíveis para estudar um sistema físico como o que se apresenta. Neste trabalho as amostras são constituídas de microcristais de LiNbO₃ que passaram pelo processo de troca por prótons em diferentes fontes protônicas tais como ácido sulfúrico, ácido fosfórico e ácido benzóico. As medições apresentam duas linhas cujas frequências centrais não são coincidentes, indicando a possibilidade da existência de pelo menos dois sítios diferentes onde os prótons se alojariam. As diferentes taxas de relaxação spin-rede para as duas linhas é um indicativo adicional da existência de diferentes sítios. Por outro lado, a diferença entre as larguras de linha, em temperatura ambiente, expressa a diferença de mobilidade existente em tais sítios. A correlação entre as informações obtidas e as possibilidades de um quadro microscópico resultante do processo de troca por prótons será discutida.

MOBILIDADE MICROSCÓPICA ESPACIALMENTE HETEROGÊNEA E RELAXAÇÃO SPIN NUCLEAR-REDE

ENGELSBERG, M.; SOUZA, R. E. DE

Grupo de Espec. e Imagens por RMN - Dep. de Física - UFPE

Muitos sistemas desordenados como polímeros, vidros, semicondutores amorfos e outros apresentam um comportamento peculiar nas suas propriedades de transporte e nos fenômenos de relaxação em comparação com sistemas cristalinos semelhantes. Tais diferenças têm sido atribuídas a uma distribuição de probabilidades para os tempos de residência cujo valor médio diverge. Assim, o tempo médio de residência para um átomo ou elétron antes de uma mudança de sítio perderia seu significado físico normal e unicamente a distribuição de probabilidade para estes eventos poderia ser invocada. Como consequência desta hipótese os fenômenos de relaxação deveriam apresentar um comportamento temporal caracterizado por uma exponencial esticada. No caso da RMN em alguns polímeros este comportamento não exponencial na relaxação é efetivamente observado acompanhado de uma mobilidade microscópica espacialmente heterogênea. Um caso interessante de mobilidade microscópica espacialmente heterogênea é o sistema $PbF_2:X^+$ ($X=Na$ ou K). Neste sistema cristalino onde o ion dopante introduz uma desordem, o F^{19} apresenta uma mobilidade espacialmente heterogênea devido a que a vacância de fluor, criada pela compensação da carga da impureza aliovalente, permanece ligada ao ion alcalino pela interação Coulumbiana a temperaturas não muito altas. A relaxação spin-rede apresenta neste caso um comportamento também não exponencial e uma dependência com a temperatura e frequência bastante anômalos. Entretanto, a diferença dos casos anteriores, estas anomalias podem ser satisfatoriamente explicadas supondo válida a teoria clássica que envolve um único tempo médio característico para o movimento da vacância. A análise permite extrair os parâmetros usuais que caracterizam o movimento apesar do comportamento não exponencial.

REDUÇÃO DE TEMPO DE RELAXAÇÃO SPIN-REDE EM PEQUENAS PARTÍCULAS

RABBANI, S. R.

IFUSP

EDMONDS, D. T.

Oxford University

Apresentamos um método para reduzir o tempo de relaxação spin-rede nos sólidos policristalinos sem introduzir impurezas paramagnéticas. Este método se baseia no fato de que o tempo de relaxação dos núcleos na superfície é normalmente muito mais curto do que no volume, devido à maior liberdade de movimento. O bom contato térmico entre os núcleos similares na superfície e no volume permite reduzir drasticamente o

tempo de relaxação da amostra, através da redução do tamanho das partículas por diferentes meios.

Para certificar que a estrutura química dos comopostos não é alterada durante o processo de moagem, utilizamos a dupla ressonância quadrupolar nuclear para obter os espectros da ressonância quadrupolar nuclear de ^{14}N , ^{2}D ou ^{23}Na para as mesmas amostras com diferentes tamanhos de partículas. Em todas as amostras, exceto tiosulfato de sódio o espectro de RQN se manteve inalterado depois da moagem, porém, o tempo necessário para a obtenção do espectro foi reduzido. No caso de tiosulfato de sódio, apesar de que nenhuma mudança química pode ser detetada, o espectro de RQN foi marcadamente alterado.

Apresentamos os dados experimentais para mostrar a eficiência do método e ainda descrevemos um modelo simples para explicar o fenômeno.

ESTUDIO POR RCN DE DESORDEN ORIENTACIONAL EN CLORATO DE SODIO.

ZAMAR, R. C.; GONZÁLEZ, C. E.; RODRÍGUEZ, C. R.; PUSIOL, D. J.

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba - Argentina

Se presenta un estudio experimental y numérico del desorden orientacional del ClO_3Na . El comportamiento con la temperatura de la frecuencia de RCN, el tiempo de relajación spin-red y el espectro de RCN del ^{35}Cl , fueron analizados en términos de un modelo de reorientaciones del ión clorato. Este análisis sugiere que hasta los 380 K el comportamiento de los parámetros de la RCN pueden asociarse a un mecanismo en el que el átomo de cloro salta entre las posiciones de equilibrio de un doble pozo de potencial asimétrico. Se generaría entonces en la red cristalina un desorden orientacional de baja concentración que puede considerarse como estático en la escala de tiempos de la RCN. La simulación numérica de las formas de línea refuerza esta hipótesis. A temperaturas mayores este modelo deja de representar los datos experimentales. Los espectros observados sólo pueden ser simulados suponiendo la existencia de clusters con elevada concentración de desorden.

SIMULACION DE ESPECTROS DE RCN EN CRISTALES MOLECULARES PARCIALMENTE DESORDENADOS

GONZÁLEZ, C. E.; PUSIOL, D. J.

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Córdoba - Argentina

Los sistemas parcialmente desordenados son arreglos cristalinos en los cuales la periodicidad, traslacional u orientacional está disminuida. Los espectros de Ressonancia Cuadrupolar Nuclear, RCN, contienen información sobre la distribución estadística de gradientes

de campo eléctrico (GCE) en cristales con desorden estático. En este trabajo se simula la contribución intermolecular a los espectros de RCN mediante el cálculo del GCE en el sitio del núcleo resonante, tratando a las moléculas que componen el cristal como dipolos eléctricos. Se generan arreglos tridimensionales de alrededor de 1000 dipolos con los parámetros de red reales de los cristales bajo estudio. Se simula el desorden orientacional homogéneo permitiendo que los dipolos adopten algunas orientaciones fijas compatibles con la simetría cristalina. La distribución de dipolos desordenados, con una concentración pre-fijada es simulada mediante un algoritmo de Monte Carlo. Se supone que un cristal macroscópico está formado por un gran número de 'unidades de simulación', cada una con una configuración de desorden compatible con la concentración fijada. Las líneas de RCN inhomogéneamente ensanchadas pueden ser identificadas con la distribución de GCE en un cristal.

RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR EM SUPERCONDUTORES DE ALTO T_c

AULER, L. T. S.

USP-São Carlos

BERTHIER, C.; BERTHIER, Y.; GILLET, J. A.;

SEGRANSAN, P.

Université Joseph Fourier (Grenoble-França)

HORVATIC, M.

SNCI/CNRS (Grenoble-França)

HENRY, J. Y.

CEMG Grenoble(França)

A descoberta dos chamados supercondutores de alto T_c motivou o surgimento de uma nova área da física do estado sólido dedicada ao estudo deste fenômeno. Os resultados até agora obtidos revelaram que os óxidos de cobre supercondutores de alto T_c são materiais mais interessantes do que se imaginava, apresentando diver-

sas anomalias nas propriedades do seu estado normal ($T > T_c$). Acredita-se que o magnetismo e o forte caráter bi-dimensional presentes devem ser responsáveis por estas anomalias e o alto T_c . Neste trabalho empregamos as técnicas das Ressonância Quadrupolar Nuclear (RQN) e Magnética Nuclear (RMN) para estudar as propriedades magnéticas do estado normal destes sistemas. Apresentaremos os resultados das experiências realizadas em monocristais de $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ ($x = 0,5, 0,92$ e 1), focalizando os núcleos de ^{89}Y , ^{63}Cu e ^{17}O sob orientações de campo paralela e perpendicular aos planos CuO_2 . As medidas dos parâmetros estático (Deslocamento Hiperfino Magnético) e dinâmico (T_1 e T_2) dos diferentes núcleos e sítios permitiram investigar a susceptibilidade generalizada $\chi(q, \omega) = \chi'(q, \omega) + i\chi''(q, \omega)$ para diferentes regiões da zona de Brillouin no limite de baixas energias. Nossos resultados serão comparados aos da técnica de espalhamento inelástico de nêutrons (que mede $\chi(Q, \omega)$ para energias intermediárias) na medida em que algumas de nossas amostras eram pequenos pedaços dos cristais utilizados para as medidas de nêutrons (Grenoble e Saclay-França). Observamos diferentes dependências em temperatura da susceptibilidade estática e dinâmica em função da dopagem mostrando a existência de um "crossover" de um regime sub-dopado a sobre-dopado, que ocorre a uma concentração de oxigênio correspondente ao T_c máximo. A abertura de um "gap" de spin nas excitações magnéticas a uma temperatura $T > T_c$ no regime sub-dopado foi evidenciada pela análise conjunta dos resultados de T_1 e T_2 do cobre dos planos. Não foi verificada nenhuma dependência das taxas de relaxação com a intensidade do campo aplicado. Serão discutidos alguns cenários teóricos propostos para interpretar o conjunto dos resultados de RMN e nêutrons.

SEMICONDUCTORES

Workshop: Tunelamento Quântico
(SEM) - 08/06/94

RESONANT TUNNELING IN DOUBLE-BARRIER SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES

STUDART, N.

Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos 13565-905, São Carlos, SP, Brasil

In this talk we review recent results of resonant tunneling in ultrasmall double-barrier devices. Effects coming from the single electron tunneling, subband mixing, impurities and Coulomb charging are considered in order to understand the nature of the fine structure observed in current-voltage characteristics. The quantum-dot magnetic subbands are determined and a multichannel resonant tunneling formalism is developed to study the influence of the magnetic field on the electronic properties of quantum dots formed by the barriers and the quantum well laterally confined.

MAGNETOTUNNELING INVESTIGATIONS OF RESONANT TUNNELING DEVICES

ALVES, E. S.

Departamento de Física, ICEx, UFMG, Caixa Postal 702, 30161-970, Belo Horizonte, MG

Magnetotunneling measurements have proved to be an excellent tool to study the current-voltage characteristics of tunneling devices. In this talk we review the use of high magnetic fields and its effects on the electrical transport characteristic of resonant tunneling structures. Landau-level structures arising in the presence of a quantizing magnetic field are used to investigate elastic and inelastic scattering, charge build-up and ballistic transport in double-barrier devices. We also discuss investigations on coupled double-quantum well devices in a magnetic field.

CURRENT FLUCTUATIONS IN MESOSCOPIC TRANSPORT

ANDA, E. V.

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

The Keldysh non-equilibrium Green function formalism is used to study the current-noise characteristic of a general mesoscopic system under the influence of an external electric and magnetic field including the Coulomb interaction between the carriers. We applied the formalism to study : i) A Double Barrier Heterostructure. A simplified scheme is proposed to include self-consistency between the electronic charge inside the well and the electrostatic potential along the device. We obtain a general expression for the frequency-dependent current fluctuation that reduces to the well known results given by the transmission approach in the zero frequency limit. Our numerical results are in good agreement with recent experimental data. By means of an approximate calculation we show that phase coherence has a negligible effect in the noise characteristic of the system. ii) A One-dimensional Double-Barrier-Heterostructure. The correlation between electrons are restricted to a region inside the well. The system is described by a generalized Anderson Impurity Hamiltonian. The Coulomb blockade suffered by the flowing charges and its consequences on the shot noise are studied. The frequency dependence of the noise is discussed in terms of the life-time associated with the correlated electrons inside the well. iii) The Bohm-Aharonov Circular Ring. The current fluctuation of a mesoscopic ring in the ballistic transport regime is studied as a function of the Fermi energy and the applied external magnetic field and frequency. The behaviour of the shot noise as a function of the magnetic flux is very sensitive to the value of the Fermi energy. For zero frequency and a Fermi level such that the transmission is maximum the shot noise has oscillations with period $h/2e$. For a Fermi energy corresponding to a minimum the period of the oscillations is h/e , as for the current.

Tunelamento e Transporte Elétrico (SEM) - 08/06/94

MAGNETOABSORPTION IN SUPERLATTICES IN CROSSED ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS CONFIGURATION

MARQUES, G. E.; STUDART, N.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE
FEDERAL DE SÃO CARLOS

COHEN, A. M.

UNIVERSIDADE DO AMAZONAS, DEPARTAMENTO
DE FÍSICA

OLIVEIRA, L. E. M.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA, UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE CAMPINAS

We are studying the dynamics of carriers in superlattices under the action of an in-plane magnetic field and an electric field applied along the growth direction of a superlattice. The possible types of cyclotron orbits and frequencies, such as normal orbits centered in the middle of a well or a barrier or the "skipping orbits", whose centers are away from the mentioned symmetry points and their respective Landau level energies are discussed. Also, effects of external electric fields forming the so called "Stark-Ladder" will also be addressed. The magneto subband dispersions and the respective wavefunctions are calculated by using a full 8x8 Kane-Weiler $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonian approach. From these magneto subband structures we proceed to calculate the full magnetoabsorption coefficient for any kind of polarization of the incident light.

TRANSPORTE QUÂNTICO POR MINIBANDAS EM SUPER-RÊDES SEMICONDUCTORAS DOPADAS

HENRIQUES, A. B.; ORTEGA, P. L. J.; SHIBLI, S.
M.

Instituto de Física da USP, C.P.20516, 01498 São Paulo,
SP

Super-rêdes semicondutoras dopadas com doadores rasos exibem uma magneto-resistência oscilatória, que constitui uma impressão digital da respectiva superfície de Fermi (SF). A periodicidade e a forma da linha das oscilações da magneto-resistência codificam informações fundamentais tais como a distribuição da densidade de portadores entre as minibandas e o alargamento dos estados energéticos eletrônicos. Estudos recentes em $InAs_{1-x}Sb_x/InSb$ mostraram que minibandas cheias podem contribuir com um ou dois períodos de oscilação, correspondentes aos cortes extremos da SF, denominados 'cintura' e 'pescoço'.

A densidade de estados eletrônicos de uma super-rêde

semicondutora, com um campo magnético perpendicular aos planos de confinamento foi modelada na aproximação 'tight binding', incluindo um alargamento Lorentziano (γ) dos estados eletrônicos. O modelo teórico permite extrair a componente oscilatória de ρ_{xx} do tensor de resistividade em função do campo magnético aplicado. O espectro de potência de Fourier pode ser calculado analiticamente. Verifica-se que a cintura e pescoço só podem ser resolvidos nas condições $\gamma < \Gamma$, sendo Γ a largura energética da minibanda. Os resultados teóricos são comparados com espectros Shubnikov-de Haas em $GaAs$:*Si*. O desvio do modelo tight-binding é estudado.

CONDUCTANCE FLUCTUATIONS IN COUPLED QUANTUM WELLS IN THE PRESENCE OF AN IN-PLANE MAGNETIC FIELD.

GUSEV, G. M.; LUBYSHEV, D. I.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade
de São Paulo, SP, Brasil

ROSSI, J. C.

Universidade Federal de São Carlos, SP, Brasil

GENNSER, U.; MAUDE, D. K.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de
la Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble and
INSA-Toulouse, 31077, France

To observe the Aharonov-Bohm effect in two-dimensional (2D) electron gas, the geometry of the lateral submicron ring was used. In samples with two coupled quantum wells (QW) separated by thin barrier, electron interference is determined by the tunneling of carriers between quantum wells. This system can be used to fabricate electron interferometer and equilibrium tunneling process investigation. In order to observe Aharonov-Bohm effect in such structures the magnetic field should be applied in the plane of 2D electron gas. In this work we report the conductance fluctuations in the system with 2,3 and 5 GaAs QWs separated by $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ barriers. The width of QW was 100 Å and barrier thickness of 50 Å. The samples were a mesoscopic H-shaped devices with length of bridge 10-15 μm and width 1-3 μm . All samples reveals the reproducible conductance fluctuations under an in-plane magnetic field up to 15T at 0.3 K. The average oscillations amplitude was found to be 3 times smaller, than the amplitude of the universal conductance fluctuations in a perpendicular magnetic field. Therefore, we suggested, that the origin of the magnetoconductance fluctuations in a parallel field is following: an in-plane magnetic field creates a relative shift in the momentum space between Fermi circles corresponding to the different QW, and this results in a nonmonotonic behavior of the tunneling time. It introduces an additional phase shift to the interference picture, as the closed electron

trajectories themselves are changed. We found the differences in the behavior of oscillations for system with 2,3 and 5 QWs. This work is supported by FAPESP and CNPq.

PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO EM BARREIRAS DUPLAS NÃO-ABRUPTAS DE

$GaAs/Al_xGa_{1-x}As$

CARVALHO, R. R. L. DE; FREIRE, V. N.; AUTO, M. M.; FARIAS, G. DE A.

Universidade Federal do Ceará

Propriedades de transmissão de elétrons em barreiras duplas simétricas de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com interfaces abruptas e não-abruptas são calculadas e comparadas. A dependência espacial do potencial e da massa efetiva nas regiões interfaciais são obtidas com a hipótese de uma variação linear da fração molar de alumínio nestas regiões. Quando a energia E do elétron é menor do que a altura V_x da barreira dupla, mostra-se que a largura das interfaces externas afeta fracamente as propriedades de transmissão, *i. e.* as propriedades de tunelamento em barreiras duplas abruptas e não-abruptas são praticamente as mesmas neste caso. Entretanto, efeitos de não-abrupticidade nas interfaces externas mostram-se importantes quando $E > V_x$, mesmo para uma largura interfacial tão pequena quanto dois parâmetros da rede do GaAs. As larguras das interfaces internas das barreiras não-abruptas são mais importantes do que as larguras das interfaces externas, e afetam as propriedades de transmissão tanto para $E < V_x$ como para $E > V_x$. Elas deslocam os picos de ressonância do coeficiente de transmissão de barreiras duplas não-abruptas para energias mais elevadas quando comparados com aqueles de barreiras duplas abruptas.

TUNELAMENTO RESSONANTE INTERBANDA VIA NÍVEIS DE LANDAU

DAVIDOVICH, M. A.

Departamento de Física, PUC-Rio

FERREYRA, J.; PROETTO, C.

Instituto Balseiro - Centro Atômico de Bariloche

ANDA, E. V.

Instituto de Física, UFF

As curvas corrente \times voltagem ($I \times V$) para tunelamento ressonante interbanda apresentam correntes com altas intensidades de pico e altos valores da relação pico de corrente/vale de corrente, fatores que tornam esse processo muito atraente do ponto de vista de suas aplicações em dispositivos eletrônicos de alta frequência. Este processo, que envolve transporte de

cargas entre bandas de condução e de valência, foi observado^(1,2) em barreiras duplas de InAs/GaSb/AlSb sem e com a presença de um campo magnético paralelo à corrente. Neste trabalho estendemos o método que utilizamos para estudar transporte interbanda⁽³⁾ a fim de incluir os efeitos da presença de um campo magnético paralelo à corrente de tunelamento. Utilizamos um Hamiltoniano de ligações fortes de seis bandas cujos parâmetros são expressos em termos dos parâmetros de Kane e de Luttinger e que portanto reproduz a estrutura de bandas dos cristais envolvidos, na presença de um campo magnético. Obtemos as correntes em função da voltagem para vários valores do campo magnético externo, através do cálculo de funções de Green fora de equilíbrio e utilizando o formalismo de Keldysh. A aplicação do campo magnético altera drasticamente as características da curva $I \times V$. Esta apresenta várias estruturas, com regiões de resistência diferencial negativa, correspondendo a tunelamento via os diferentes níveis de Landau. Devido as diferenças de curvatura e de massas efetivas das bandas de valência e de condução a curva $I \times V$ para o tunelamento interbanda difere substancialmente das curvas características para tunelamentos convencionais, como é o caso do GaAs/AlGaAs. (1) J.R. Soderstrom, D.H. Chow and T.C. McGill, *App. Phys. Lett.* **55**, 1094 (1989). (2) E.E. Mendez, H. Ohno, L. Esaki and W.I. Wang, *Phys. Rev.* **B43**, 5196 (1991). (3) Maria A. Davidovich, E.V. Anda, C. Tejedor and G. Platero, *Phys. Rev.* **B47**, 4475 (1993)

ELECTRON MOBILITY DUE TO IONIZED IMPURITY SCATTERING IN Si δ -DOPED

GaAs

HAI, G.; STUDART, N.

UFSCar

PEETERS, F. M.; DEVREESE, J. T.

Univ. of Antwerp (UIA), Belgium

The ionized impurity scattering mechanism and the electron mobility have been investigated for Si δ -doped GaAs systems at low temperature. The confinement potential profile, the subband energy, wavefunction, and the population of the different subbands are obtained from self-consistent calculation of the coupled Poisson and Schrödinger equations. The transport mobility and the quantum mobility are calculated within a dipole scattering model for Si δ -GaAs system of high doping concentration. In our approach, we included: 1) intra- and inter-subband scattering because several subbands are occupied, and 2) the screening effect due to the high electron density. A systematic investigation is performed of the dependence of the electron mobilities

on the width of the doping layer and the total electron concentration. Our calculation is in good agreement with the recent experimental results.

Sistemas Mesoscópicos, Transporte Elétrico e Dispositivos (SEM) – 08/06/94

INFLUENCE OF QUANTUM INTERFERENCE EFFECT ON HOLE MOBILITY IN SUPERLATTICES

SON, N. H.; NAZARENO, H. N.

International Centre of Condensed Matter Physics

An influence of quantum interference (weak localization) on perpendicular transport of holes in superlattices is investigated. Due to heavy hole effective mass, the collisional broadening Γ can be large than the Fermi energy ϵ_F . In such situations the quasi-particle approximation breakdown and the particle-particle diffusion propagator (come from coherent backscattering) contains the effective diffusion coefficient D_Z which significantly differs from the classical one. In this case the four-leg vertex function $\Gamma(\vec{p}, \vec{p}')$ can not be approximated by the sum of maximally crossed diagrams and the correction to the conductivity caused by quantum interference is not small. To go beyond this limitation the quantum transport equation is used. Numerical calculations of the hole mobility versus superlattice period and temperature have a good agreement with experimental results and show a significant deviation from previous theories. In principle our theory can be used to study weak localization in semiconductor systems where the electron gas usually is non-degenerated and the metallic limit ($\epsilon_F \gg \Gamma$) is not fulfilled.

OSCILLATIONS OF THE IMPURITY SWITCHING TIME WITH MAGNETIC FIELD IN A MESOSCOPIC CONDUCTOR.

GUSEV, G. M.; LUBYSHEV, D. I.; NASTAUSHEV, Y. V.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

ROSSI, J. C.

Universidade Federal de São Carlos, SP, Brasil

GENNSER, U.; MAUDE, D. K.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de la Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

Small semiconductors and metall devices can exhibit two-level switching due to the tunneling between two

metastable state of a single defect. In ref.1 it has been predicted that it should be possible to alter the position of the defect states using magnetic field-induced local fluctuations in the electron density. The chaotic variation of the energy asymmetry of the defect double well potential ϵ with maximum variation of the order $\hbar\omega_c(\ell/L)^{1/2}$, where ω_c is the cyclotron frequency, ℓ is the electron mean free path, and L is the sample size, should be observed for this mechanism.

In this work we observed the conductance switching between two quasi-stable values in mesoscopic samples of $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ with disordered lattice of antidots (periodicity of lattice $0.3 \mu\text{m}$, deviation of antidots from their position in periodic lattice $0.038 \mu\text{m}$, sample size $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$). We believe, that in this system single impurity switching dominates as the overlapping of the depletion region around antidots allows for only a few conductivity channels through the sample. The fluctuations of the ratio (dwell time in the higher resistance state)/(total time of measurements) with magnetic field were found. The average number of steps needed (obtained from a large number of traces of the same type) gives us the correlation field B_c . We found $B_c = \epsilon m/e\hbar = 0.05\text{-}0.1 \text{ T}$, corresponding to the energy $\epsilon = 0.09\text{-}0.18 \text{ meV}$, which is 4-8 times larger than kT . We observed the large difference in the picture of fluctuations between impurity states even when the measurements were done directly after each other. The influence of the other defects on the dominating impurity level in the sample should be responsible for this behaviour. This work is supported by FAPESP and CNPq.

1. B.L. Altshuler and B.Z. Spivak, JETP Lett. 42, 447 (1985).

CHARGE TRANSFER BETWEEN PERCOLATION LEVELS IN A SYSTEM WITH AN ARTIFICIAL, STRONGLY DISORDERED POTENTIAL.

GUSEV, G. M.; LUBYSHEV, D. I.; NASTAUSHEV, Y. V.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

ROSSI, J. C.

Universidade Federal de São Carlos, SP, Brasil

GENNSER, U.; MAUDE, D. K.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de la Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

Transport in a two-dimensional electron gas through a lattice of antidots in $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ heterostructures has attracted much attention because of the possibility to artificially create systems of different type of arrangements of the scatterers. One example of particular interest is a disordered antidot lattice, with antidot diameters comparable to the periodicity of the lattice.

Due to the overlapping depletion regions around the antidots, only a few percolation levels will be allowed through the sample. In this work we report hysteresis of the magnetoresistance in mesoscopic samples with a disordered antidot lattice. The periodicity of the lattice was $0.3 \mu\text{m}$, the deviation of antidots from the periodic position was $0.038 \mu\text{m}$, and the sample size $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$. Two peaks were observed when sweeping the field up to 15 T. These changed into two deep minima with almost the same amplitude as the peaks, when the magnetic field was swept down. This behaviour was reproduced during numerous magnetic field sweeps. We believe, that the hysteresis in the magnetoresistance is due to charge transfer from one closed percolation level to another, with dissipative conductance equal to zero [1]. The transferred charge $\Delta Q = \sigma_H S \Delta B / c$, where σ_H is the Hall conductivity, and S is the area between closed trajectories. The sign of the transferred charge is determined by the sweep of the magnetic field (up or down). Charging of the external closed path alters the local potential landscape, changes the width of any barriers and, consequently, the transmission coefficient of the conduction channels. Assuming that S is comparable to the sample area, we find that $\Delta Q = 8e$ and $16e$ for the two oscillations, respectively, i.e. more than the single electron charge. This work is supported by FAPESP and CNPq.

1. R.B.Laughlin, Phys.Rev.B 23, 5632 (1981).

NEGATIVE MAGNETORESISTANCE IN COUPLED QUANTUM WELLS.

GUSEV, G. M.; LUBYSHEV, D. I.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

ROSSI, J. C.

Universidade Federal de São Carlos, SP, Brasil

GENNSER, U.; MAUDE, D. K.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de la Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

Recently the properties of the two-dimensional (2D) electron gas in double quantum wells (QW) separated by tunneling barrier has attracted a much attention, due to its potential as a model system for study the electron-electron interaction. In particular, the investigation of the electron interference phenomena which include weak localization, Aharonov-Bohm oscillations in small rings and universal conductance fluctuations in mesoscopic conductors can provide information on the mechanism of the electron-electron scattering in 2D gas.

In this work we report the measurement of negative magnetoresistance due to the weak localization in sam-

ples containing coupled quantum wells. The width of QW was 100Å and thickness of barrier 50Å . On either side of nominally undoped quantum well region are 200Å of undoped spacer layer which separates the active Si-doped AlGaAs layers. We determined the dephasing time from the negative magnetoresistance. It shows a weaker temperature dependence than T^{-1} -dependence expected for the case of electron-electron scattering with the small momentum transfer. When magnetic field sweeps up to the higher values, the quite linear negative magnetoresistance was found. We suggested, that in QW system backscattering between edge states is suppressed because of the tunneling between layers. This work is supported by FAPESP and CNPq.

DIODE BASED ON THE 2D ELECTRON GAS IN AN ARTIFICIAL, STRONGLY DISORDERED POTENTIAL.

GUSEV, G. M.; NASTAUSHEV, Y. V.; LUBYSHEV, D. I.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

Using electron beam lithography it is possible to reduce the feature size of heterostructures GaAs/AlGaAs with two-dimensional (2D) electron gas to below the mean free path, allowing for the introduction of an artificial lattice of antidots, or scatterers. The degree of randomness of the potential, and the number of conduction channels can therefore be controlled. In particular, in disordered lattice with antidot diameter compared to the periodicity because of the overlapping of the depletion regions around the antidots only a few percolation levels will be allowed through sample. In this work we report new principle of device with asymmetric I-V characteristics fabricated on the basis of 2D electron gas in samples with disordered antidot lattice. The periodicity of lattice was $0.3 \mu\text{m}$, the deviation of antidots from the periodic position was $0.15 \mu\text{m}$, and sample size $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$. Thus, the lattice was completely disordered in contrast to the samples with medium degree of disorder (deviations $0.038 \mu\text{m}$), which reveals linear I-V characteristics (see abstract of this Proceeding). We found quasi-linear increase of current through samples with completely disordered lattice for one sign of the applied voltage at $T=300 \text{K}$. We did not observe any current ($I < 10^{-8} \text{A}$ at $V=1 \text{V}$) for reverse sign of the voltage. Direct current was very sensitive to the illumination by the visible light. We believe that disordered nature of the artificial potential is responsible for this behavior. In the internal part of the sample exist electron lakes which are charged by electrons when the current passes in one direction (lakes with one exit). Charging of these lakes alters the local potential landscape, increase the barriers and decrease the transmission coefficient of the the conduction channels. For the reverse sign of the current the charging of the external

lakes is negligible small, and barriers for electrons are not changed. This method can be used for the fabrication of the nanometer-scaled planar GaAs diodes and transistors. This work is supported by FAPESP and CNPq.

ASSIMETRIA DA SUPERFÍCIE DE FERMI EM UMA HETEROJUNÇÃO COM DOPAGEM SELETIVA SOB CAMPO MAGNÉTICO PLANAR

ALVES, A. R.

Universidade Federal de Viçosa

GUIMARÃES, P. S. S.; CHAVES, A. S.; MOREIRA, M. V. C. B.; OLIVEIRA, A. G. DE

Universidade Federal de Minas Gerais

O gás de elétrons Bidimensional (2DEG) confinado em uma Heterojunção com Dopagem Seletiva se encontra espacialmente separado da região de impurezas doadoras ionizadas. Isto lhe proporciona altíssimas mobilidades a baixas temperaturas. Trata-se então de uma estrutura particularmente interessante. Cálculos numéricos^a têm mostrado que a ação de um campo magnético paralelo a interface da Heterojunção gera um efeito tipo diodo. Este efeito é resultante da assimetria da Superfície de Fermi, provocada pela concorrência entre o confinamento eletrostático do poço e o potencial magnético. Neste trabalho, apresentam-se resultados experimentais em que se mediu a resistividade do gás de elétrons sob campo planar, comprovando-se o efeito diodo citado acima. As medidas foram realizadas a 4K com o campo magnético variando de 0 a 15T. Finalmente, visando a uma melhor compreensão do problema, mostra-se analiticamente que, sob a ação de um campo magnético planar, uma simples aproximação do tipo $V(z) = az^2 + bz$ para o poço de potencial da Heterojunção é suficiente para produzir a referida assimetria. ^a A. S. Chaves et al, Submitted to Appl. Phys. Lett. (1994)

TUNELAMENTO RESSONANTE EM DOTS: CONFINAMENTO RADIAL HARMÔNICO OU NÃO?

WAKI, M.

Escola Federal de Engenharia de Itajubá

WATARI, K.

Instituto de Física da USP

A modelagem da curva característica de dispositivos ressonantes OD, tem sido feita com relativo sucesso usando-se o modelo desenvolvido por Bryant(1,2). Esse modelo admite que o potencial de confinamento lateral pode ser descrito por um poço parabólico, e eventuais discrepâncias entre medidas experimentais e previsões

baseadas neste modelo devem-se à não-parabolicidade da banda, sem que cálculos específicos sejam apresentados. Assim sendo, nos propusemos a avaliar o quão anarmônico pode ser o potencial de confinamento lateral. A determinação do perfil da banda de condução através de um dispositivo de tunelamento ressonante, foi feita a partir do cálculo autoconsistente da equação de Poisson com a aproximação semi-clássica de Thomas-Fermi e condições de contorno adequadas. Como referência, usamos em nossos cálculos o dispositivo descrito por Reed(3). O perfil resultante foi seccionado em um conjunto de cortes radiais, aos quais foram ajustados, por χ -Quadrado mínimo, polinômios de grau variável até QUATRO. Os melhores ajustes foram obtidos quando os polinômios utilizados eram de quarto grau. Uma vez que nossos resultados mostram que as contribuições dos termos de 3o. e 4o. graus são da mesma ordem de grandeza que os termos harmônicos, torna-se inadequada a sua introdução no modelo de Bryant através do uso de Teoria de Perturbações e nos levam a supor que a intensidade e a posição dos picos de ressonância de corrente devem ser bastante diferentes dos obtidos até agora.

REFERÊNCIAS

- 1-Bryant, G.: Phys. Rev. B v39, 3145 (1989)
- 2-Bryant, G.: Phys. Rev. B v44, 3782 (1991)
- 3-Reed, M. A. et al.: Phys. Rev. Lett. v60, 535 (1988)

EFEITOS DO RECOZIMENTO RÁPIDO NOS NÍVEIS PROFUNDOS EM DIODOS SCHOTTKY DE W/GaAs.

PUDENSI, M. A. A.

LPD/DEA-IFGW-UNICAMP

FAVORETTO, M.; SWART, J. W.

DSIF/FEE-UNICAMP

Na fabricação de MESFET auto-alinhado de GaAs é necessário diodos Schottky termicamente estáveis. Estudos recentes mostraram que é possível obter-se bons diodos de W/GaAs após recozimento a 820°C por 10 segundos ou 850°C/5seg, otimizando-se as condições de deposição do W sobre o GaAs-n e usando sobrepressão de As durante o recozimento. Neste trabalho apresentamos os resultados da análise dos níveis profundos detectados nestes diodos, usando Espectroscopia de Transiente de Níveis Profundos (DLTS), para várias temperaturas de recozimento. Observamos que o recozimento entre 600°C e 750°C por 10 segundos, com sobrepressão de As, faz com que os níveis profundos associados a arsênio intersticial e/ou As_{Ga} aumentem de concentração. Para 820°C por 10 segundos, somente a concentração do EL2 continua aumentando, ficando comparável à concentração de portadores livres da amostra. Este comportamento do EL2, associado a uma possível difusão de W no GaAs, pode ser a causa do aumento na

resistência em série de diodos recozidos a 850°C/10s e que apresentaram características Schottky degradadas.

PERSISTANT CURRENT IN ISOLATED MESOSCOPIC RINGS

WEISZ, J.

Universidad Nacional del Litoral, Argentina

KISHORE, R.

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciaes

KUSMARTSEV, F. V.

University of Oulu, Finland

Persistent current in isolated mesoscopic rings is studied using the continuum and tight-binding models of independent electrons. The calculation is performed with disorder and also at finite temperature. In the absence of disorder and at zero temperature agreement is obtained with earlier results by D. Loss et. al., in that there is half quantum flux periodicity for a large and odd number of electrons, but full quantum periodicity for any even number of electrons in the ring. Strong disorder converts the period into full quantum periodicity. Finite temperature reduces the magnitude of the current, but preserves the quantum flux periodicity at zero temperature. However the sign of the current may change as disorder or temperature is increased. A generalization of the parity effect, previously discussed by Leggett, Loss, and Kusmartsev is described for the case where there are electrons with spin, influenced by finite temperature and disorder.

A simple model to study the combined effect of magnetic field and electron-phonon interaction in double-barriers heterostructures

TUYAROT, D. E.; MAKLER, S. S.; ANDA, E. V.

Depto. de Física, Univ. Federal Fluminense, Niteroi

We studied the resonant tunneling in a double-barrier heterostructure (DBH) with electron-phonon interaction under the presence of a magnetic field, using an approach that permits to get analytical results. The system is represented by a tight-binding Hamiltonian, with nearest neighbours interaction. The barriers are modeled by a different hopping value, and the well is simulated by a single site with renormalized energy. The relevant electron-phonon interaction occurs inside the well with the longitudinal optical phonons (LO), and it is considered here by a Fröhlich term in the Hamiltonian. The system has plane wave solutions at the left and the right of the DBH. These solutions can be matched through a simple recurrence relation obtained from the equations of motion. This matching is done analytically. We display the shape of the transmittance vs. energy and characteristic current-voltage curves in

presence of the electron-phonon interaction and magnetic field. This curves are in agreement with experimental data and previous theoretical calculations.

ESTUDO DE MAGNETO TUNELAMENTO EM SUPER-REDES TIPO MULTIPOÇOS QUÂNTICOS

VIEIRA, G. S.; GUIMARÃES, P. S. S.; MOREIRA, M. V. B.; OLIVEIRA, A. G. DE

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

As propriedades de transporte elétrico de barreiras duplas, triplas e super-redes de barreiras estreitas (nas quais ocorre a formação de minibandas) têm sido exaustivamente estudadas. Super-redes tipo multipoços quânticos, onde o transporte elétrico perpendicular às barreiras dá-se via tunelamento sequencial, ainda foram pouco exploradas. Neste trabalho apresentamos um estudo de magnetotransporte em super-redes tipo multipoços quânticos de GaAs/AlGaAs fracamente dopadas. Foram feitas medidas da variação da corrente, perpendicular às camadas da super-rede, com a tensão (I-V), com e sem campo magnético aplicado paralelamente às camadas. Observa-se, na curva característica I-V sem campo magnético aplicado, indicações de alargamento dos níveis dos poços da super-rede por espalhamentos de impurezas ionizadas e estruturas que acusam a existência de uma única barreira de espessura diferente das demais, em um total de 50 barreiras. Nas curvas I-V com campo magnético aplicado, observamos uma progressiva destruição das estruturas características presentes na I-V sem campo. Fez-se também medidas da variação da corrente com o campo magnético (I-B) a tensões fixas. Nas curvas I-B observamos, em campos magnéticos baixos, um aumento da corrente elétrica com o campo magnético (magnetoresistência negativa). Propomos alguns possíveis modelos para essas observações.

DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA EM FIOS E POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS ASSIMÉTRICOS E ACOPLADOS

MANZOLI, J. E.; DEGANI, M. H.; HIPÓLITO, O.

DFCM - Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Calculamos numericamente a variação dos auto-estados e das auto-energias (sub-bandas) de portadores de carga em heteroestruturas semicondutoras do tipo de poços e fios quânticos duplos assimétricos e acoplados, em

função do campo elétrico. Pacotes de onda como soma de auto-estados são formados e estudados em suas evoluções temporais. A variação de valores esperados no tempo foi numericamente calculada. Em particular estudamos o pacote soma dos dois primeiros autoestados da banda de condução, quando ressonantes devido a aplicação de um determinado campo elétrico. Tais estudos, nessas heteroestruturas, cujas dimensões são muito reduzidas, mostraram tempos de tunelamento eletrônico da ordem de pico ou femtosegundos. Estes valores são atraentes para a fabricação de dispositivos opto-eletrônicos ultra-rápidos, e seu entendimento é inerentemente quântico. O método numérico, previamente utilizado em Dinâmica Molecular, mostra-se muito útil nessas estruturas semicondutores de baixa dimensionalidade.

Two-Body Interactions in the Integer Quantum Hall Effect: A Path Integral Approach.

CARVALHO, C. A. DE; BARCI, D. G.

Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro.

MORICONI, L.

Princeton University

We study attractive and repulsive screened two-body interactions in the Integer Quantum Hall Effect. Our approach is based on a computation of the fermion determinant associated to the finite temperature partition function of the system. A Hubbard-Stratonovich transformation on the two-body interaction term is performed, which yields an effective free-energy depending on a scalar field. As a result of extremizing the free-energy, we find, in the repulsive case, stable constant solutions related to integer filling factors of the Landau-levels and non-trivial radial solutions, corresponding to excited states that represent depletion of charge in the gas. In the attractive case, we find non-trivial solutions representing accumulation of charge, with energy lower than the constant ones. The true ground state in this case is not the constant solution, opening the possibility of having non-integer filling factors related to the new ground state.

Impurezas em um Ponto Quântico: um estudo comparativo

RIBEIRO, F. DE J.; LATGÉ, A.

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - UFF

Devido ao grande potencial de aplicação tecnológico em dispositivos eletrônicos, estruturas semicondutoras de

reduzida dimensionalidade têm sido largamente estudadas nos últimos anos. Neste trabalho apresentamos um estudo teórico da energia de ligação de uma impureza hidrogenóide do tipo doadora em um sistema quasi-zero dimensional (ponto quântico), a partir da aproximação da massa efetiva, seguindo um método variacional. Mostramos aqui que a energia de ligação de doadores é fortemente dependente do volume do sistema e da posição da impureza dentro da estrutura. Este resultado é importante para um tratamento mais adequado dos espectros de absorção e fotoluminescência relacionados à impurezas. Obtem-se a partir destes cálculos que as energias de ligação de impurezas doadoras em pontos quânticos esféricos e cúbicos são muito próximos um do outro, desde que as estruturas possuam volumes bem similares. Um comportamento análogo foi obtido para impurezas em fios quânticos retangulares e cilíndricos. Estes resultados são interessantes, já que experimentalmente a forma cúbica é mais realista. Mostramos também que quando limites apropriados são levados em consideração no cálculo da energia de ligação de impurezas doadoras em pontos quânticos, os resultados obtidos anteriormente para o caso de impurezas em fios quânticos de seção reta quadrada e em poços quânticos são recuperados. Por último, analisamos a forma da densidade de estados de impurezas, comparando os resultados com o caso de impurezas em outras estruturas de baixa dimensionalidade.

Exchange and correlations effects in a semiconductor quantum-well wire

CAMPOS, V. B.

Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, S.P.

DEGANI, M. H.; HIPÓLITO, O.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, São Carlos, S.P.

The exchange and correlation effects of a quasi-one-dimensional electron gas are investigated by using the self-consistent-field approximation theory proposed by Singwi, Tosi, Land and Sjölander for the response function of the electron system. The present results are applied to GaAs-GaAlAs rectangular quantum-well wires with the appropriate form factors that take into account the influence of the finite width of the electron layer. The plasmon dispersion relation, structure factor and pair correlation function are calculated as a function of the electron density and the dimensions of the wire. Results for the electron effective mass and the total energy per electron including kinetic, exchange and correlation energy are presented. The Hartree-Fock and RPA results are also presented for comparison. We have found that exchange and correlation effects are more evident in wires of reduced dimensions.

EFEITOS DE CORRELAÇÕES DE CURTO ALCANCE EM UM GÁS DE POLARONS QUASE UNIDIMENSIONAL.

BORGES, A. N.

Universidade Federal de Goiás

DEGANI, M. H.; HIPÓLITO, O.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

Investigamos, neste trabalho, os efeitos das correlações de curto alcance em um gás de polarons num fio quântico com confinamento retangular de barreira infinita, utilizando a teoria autoconsistente de Singwi, Tosi, Land e Sjolander – generalizada[1], a qual inclui o modelo de multisub-bandas nos sistemas quase unidimensionais. Comparamos os resultados obtidos, para as curvas de dispersão do acoplamento plásmos-fônons, com resultados recentemente calculados, utilizando a aproximação RPA[2]. Observamos que mesmo para densidades relativamente altas $\rho = 1.64 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$, não podemos desprezar os efeitos das correlações de curto alcance no estudo das propriedades de fios quânticos de GaAs. Verificamos ainda que, um decréscimo na largura do poço quântico (e/ou uma diminuição da densidade eletrônica) aumenta os efeitos do campo local.

1. A. Newton Borges, M. H. Degani e O. Hipólito, *Superlatt. Microstruct.*, **13**, 1993. 2. L. Wendler, R. Haupt e R. Pechstedt, *Phys. Rev.*, **B43**, 14.699 (1991); *Surf. Sci.*, **263**, 363 (1992).

EFEITOS DA DIMENSIONALIDADE DO EMISSOR NAS CARACTERÍSTICAS CORRENTE-VOLTAGEM DE UM DIODO DE TUNELAMENTO RESSONANTE

RIOFANO, P. H. R.; SCHULZ, P. A. B.

Instituto de Física Gleb Wataghin-DFESCM-UNICAMP

Nesse trabalho discutimos a influência da formação de um gás bidimensional na interface emissor-barreira sobre a densidade de corrente de um diodo de tunelamento ressonante de dupla barreira de GaAs-AlGaAs. A formação desse gás bidimensional em função da voltagem aplicada ocorre em dispositivos onde camadas de GaAs não dopadas são crescidas entre os contatos fortemente dopados e a estrutura de barreira dupla propriamente dita. Esse procedimento diminui o espalhamento devido a impurezas ionizadas, melhorando as figuras de mérito desses diodos de tunelamento. A formação desse emissor bidimensional é estudada como função da largura dessas camadas espaçadoras, da temperatura e da voltagem aplicada ao dispositivo. Para tanto resolvemos autoconsistentemente a equação de Poisson e a equação de Schrodinger. Uma primeira análise da estrutura eletrônica do dispositivo é feita numa aproximação semi-clássica para a densidade de elétrons no emissor. Essa análise permite-nos inferir

para que parâmetros do dispositivo podemos considerar o emissor como sendo unicamente esse gás bidimensional na interface emissor-barreira, constituindo-se o contato tridimensional fortemente dopado unicamente um reservatório de elétrons, para os quais a probabilidade de transmissão através da dupla barreira são desprezíveis.

ANÁLISE DE CONTATOS RETIFICADORES n-GaAs / Au PREPARADOS POR AQUECIMENTO RESISTIVO E POR FEIXE DE ELÉTRONS

CHIQUITO, A. J.; GALZERANI, J. C.; MERGULHÃO, S.

UFSCar

Contatos retificadores de n-GaAs / Au produzidos por evaporação de metal em cadinho aquecido (resistivamente) mostram baixa reprodutibilidade. Ainda mais, estes contatos degradam-se rapidamente, deixando de ser retificadores durante as medidas de $I \times V$: A tensão de saturação passa rapidamente de 9 V para alguns milivolts. O gráfico $C^{-2} \times V$ para tensão reversa destes contatos a 100 KHz mantém característica linear apenas numa faixa bastante estreita de tensões. A concentração de portadores obtida difere consideravelmente dos valores nominais. Além disso, para estas amostras as tentativas de medir a capacitância em função da tensão direta usando circuito ponte para frequências entre 10 Hz e 100 KHz resultaram infrutíferas. Por estes motivos decidimos verificar as diferenças que ocorrem em amostras de interfaces n-GaAs / Au quando a evaporação do metal é feita utilizando-se um feixe de elétrons para o seu aquecimento. Mudanças drásticas no comportamento destes contatos ocorreram quando comparados com os contatos obtidos por aquecimento resistivo, chegando neste caso ao comportamento próximo do diodo ideal. Medidas de capacitância em função da frequência para tensão direta, permitiram observar a existência de estados de superfície nas amostras com contatos obtidos por feixe de elétrons, que não foram observados no mesmo tipo de medidas, nas amostras com contatos obtidos por aquecimento resistivo.

FOTOLUMINESCÊNCIA EM CONDIÇÕES ESTACIONÁRIAS: TEMPO DE RECOMBINAÇÃO, QUASI NÍVEIS DE FERMI E DENSIDADE DE PORTADORES EM FIOS QUÂNTICOS DE GaAs-(Ga,Al)As.

PÉREZ-MERCHANCANO, S. T.; DIOS-LEYVA, M. DE; OLIVEIRA, L. E.

UNICAMP

Neste trabalho, é feito o cálculo da densidade de portadores, quasi níveis de Fermi e tempo de recombinação

elétron-buraco para fios quânticos de GaAs-(Ga,Al)As em condições de equilíbrio. Este cálculo é feito como função da intensidade do laser, temperatura, raio do fio e distribuição de aceitadores no fio. Consideramos a recombinação radiativa de elétrons com buracos livres e com buracos ligados em aceitadores neutros. Os resultados são comparados com os obtidos por Oliveira e de Dios-Leyva [Phys. Rev. B **48**, 15092 (1993)] em poços quânticos de GaAs-(Ga,Al)As.

**ELECTRON ENERGY SPLITTING
BEHAVIOUR OBSERVED IN GaAs/AlGaAs
ASYMMETRIC COUPLED DOUBLE
QUANTUM WELL STRUCTURES**

VELASQUEZ, R.; ALVES, E. S.; OLIVEIRA, A. G. DE
Dpto de física, Univ. Federal de Minas Gerais

The effect of coupling between two quantum wells of different width with a thinner enough interwell barrier between them is studied in order to explain the appearance of energy splitting between coupled levels giving rise to two resonant peaks in the I-V characteristic at low temperature. In this work we have chosen an asymmetric structure in order to observe resonant tunnelling peaks which arise from tunnelling between electron ground states when the system is under bias condition. In order to measure the energy splitting between the coupled well states we have performed vertical magnetotunnelling measurements at 4K and under magnetic fields up to 15 tesla. We have analysed the effect of a magnetic field applied perpendicular to the interfaces on the energy splitting and have obtained an estimation of it.

**Ligth assisted electron tunneling by DX center
GaAs/AlAsGa heterostructures grown by
molecular beam epitaxy**

ROSSI, J. C.; LUBYSHEV, D.; GUSEV, G.; BASMAJI,
P.

Instituto de Física e Química de São Carlos

In the present work we describe the observation of electron tunneling effect in HEMT system. The samples used was growth by molecular beam epitaxy. The heterojunction is formed by GaAs/AlGaAs, with 80Å spacer layer grown on semi isolating GaAs substrate and a 200Å cap layer. The ohmic contact was produced by indium annealed in Nitrogen atmosphere. Schottky contact is produced by thermal evaporation of 500Å aluminium layer. The experiment consist of measurement of current voltage IxV, between two contacts. At room temperature and 77K without illumination, a typical IxV Schottky curve was observed. Under illumination at 77K a negative differential resistance NDR was observed due to electron tunneling from 2DEG to DX center. Magneto transport measurements give mobi-

lity about $139000 \text{ cm}^{-2}/\text{Vs}$, and carriers concentration of $3.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. In this system the distance between electron gas sub-band and "gate" is large for tunneling. However under illumination some carriers are generated in AlGaAs region. When gate voltage is applied, a new state appears between the gate, and the 2DEG. Therefore we observe tunneling effect.

**Barreiras duplas unidimensionais fortemente
correlacionadas**

LATGÉ, A.; ANDA, E.

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense -
UFF*

A possibilidade de fabricação de canais eletrônicos estreitos com barreiras de potenciais manipuláveis tem tornado possível um estudo detalhado dos efeitos da repulsão Coulombiana produzida pelos elétrons fortemente correlacionados no processo de tunelamento. Um tratamento adequado para o transporte eletrônico nestes sistemas deve levar em conta, portanto, as interações de muitos corpos e o fato do sistema estar numa situação de não equilíbrio. Neste trabalho desenvolvemos um formalismo para estudar a curva característica de corrente - ruído de um sistema unidimensional de barreira dupla, fortemente correlacionado, sob a influência de um campo elétrico aplicado. Adotamos um modelo microscópico para descrever o sistema que é representado por um hamiltoniano do tipo impureza de Anderson. Neste tratamento consideramos o poço caracterizado por um único estado eletrônico. A situação de não equilíbrio do sistema é tratada a partir do formalismo de Keldysh das funções de Green. Mostramos que as curvas características de corrente-voltagem exibem uma estrutura do tipo degrau que estão relacionadas ao bloqueamento de Coulomb dentro do poço. As flutuações de corrente dentro do poço são analisadas e se observa uma redução do "full shot noise" para o caso estático. Estabelecemos uma relação entre a frequência do pico do ruído e o tempo que um elétron leva para se deslocar ao longo da heteroestrutura.

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FIOS
QUÂNTICOS**

LEÃO, S. A.; SOUZA, M. A. R.; FERREIRA, J. V.
B.; DEGANI, M. H.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

A estrutura que estamos estudando é constituída por uma super-rede de fios quânticos em heterojunções de

$GaAs - Al_{1-x}Ga_xAs$ os quais são criados através de um potencial eletrostático aplicado ao gate. O período deste sistema pode variar tipicamente entre 1000 e 4000 Å. Aplicando-se uma voltagem negativa nos gates os elétrons procuram regiões de menor energia ficando confinados nas regiões entre os gates. Pretendemos calcular a estrutura de sub-bandas eletrônica para este sistema em função da voltagem aplicada no gate, assim como, explorar a possibilidade de transicionarmos de um sistema quase-bidimensional para um sistema quase-unidimensional. A solução deste problema resulta da resolução autoconsistente das equações de Schrödinger e Poisson em duas dimensões. O método utilizado para resolvermos a equação de Schrödinger é baseado na técnica do "split operator". Com este método podemos essencialmente resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo possibilitando o estudo das propriedades dinâmicas desta estrutura tais como o tempo de tunelamento entre os fios, efeitos de uma voltagem alternada aplicada aos gates, etc.. O sistema que estamos estudando apresenta uma série de parâmetros, tais como, concentração de impurezas doadoras e sua distribuição, temperatura, período dos fios, etc.. Realizaremos um estudo sistemático deste sistema para entendermos a dependência das propriedades de transporte destes fios quânticos com relação a estes parâmetros.

IMPURITY DENSITY OF STATES IN GaAs/GaAlAs QUASI-ONE-DIMENSIONAL STRUCTURE

LEÃO, S. A.; HIPÓLITO, O.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

SILVA, A. F. DA

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

The main purpose of the present study is to investigate the effects of hydrogenic impurities in a cylinder of GaAs material surrounded by GaAlAs. We assume that the impurities are placed on the axis of this cylinder quantum-well-wire structure. We calculated the density of states within a Hubbard scheme and the correlation effects are then taken into account as well as the disorder. The impurity bands are considered for the observed binding energy, radius and impurity concentration of experimental interest. We show that for a given radius and impurity concentration the lowest Hubbard band of this system overlaps the upper one. The later band remains into the unperturbed first conduction subband.

SHALLOW DONOR IMPURITY IN QUANTUM WIRE IN THE PRESENCE OF A MAGNETIC FIELD

LEÃO, S. A.; HIPÓLITO, O.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

SILVA, A. F. DA

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

We report the calculation of the impurity density of states of hydrogenic donors located on the axis of a cylinder quantum-well-wire of GaAs/GaAlAs structure in the presence of a uniform magnetic field applied parallel to the wire axis. The effects of disorder are taken into account in the calculation. It is shown that for a specific radius of the wire, the peak energy of the density of states as a function of impurity concentration and magnetic field increases enlarging the bandwidth. The impurity density of states are considered for the observed binding energy, magnetic field, radius of the wire and impurity concentration of experimental interest.

CAMADA ANTI-REFLETORA DE SnO_2 EM SUPERFÍCIE DE SILÍCIO TEXTURIZADO

CARTAXO, S. J. M.; MARQUES, F. DAS C.

UNICAMP

A texturização da superfície do silício tem sido utilizado industrialmente para reduzir a reflexão de células solares de silício de aproximadamente 30 % para cerca de 10 %. Para aumentar a eficiência destas células solares é ainda necessário o uso de uma camada anti-refletora adicional. Entretanto, os processos normalmente utilizados para preparar camadas anti-refletoras são caros e lentos devido à necessidade do uso de sistemas de vácuo. A utilização de uma camada simples anti-refletora associada a uma superfície texturizada pode ser largamente adotada industrialmente se ela puder ser fabricada por uma técnica barata. Este trabalho descreve as propriedades de células solares utilizando dióxido de estanho como camada anti-refletora depositadas sobre superfície texturizada. A texturização da superfície do silício foi obtida através do uso de um ataque químico anisotrópico baseado numa solução aquosa de NaOH ou KOH. Este processo cria uma texturização na superfície do silício com orientação (100) formada por pirâmides de base quadrada com distribuição de tamanhos ramdomica. Os filmes de SnO_2 foram depositados pelo método de spray químico, um processo relativamente barato, simples e rápido. Para avaliar as vantagens do uso do dióxido de estanho sobre uma superfície

texturizada foram fabricadas células em três condições diferentes: a) utilizando somente uma superfície texturizada, b) utilizando dióxido de estanho sobre uma superfície polida, e c) utilizando a associação da superfície texturizada com dióxido de estanho. As células solares fabricadas com o terceiro processo foram as mais eficientes.

Apoio: SCTDE (SP) e CNPq

EFEITO BOHM-AHARONOV NA FLUTUAÇÃO DE CORRENTE

ANDA, E. V.

Instituto de Física, UFF

DAVIDOVICH, M. A.

Departamento de Física, PUC-Rio

O estudo do transporte mesoscópico tem se concentrado em propriedades independentes do tempo como, por exemplo, a curva característica corrente \times voltagem. Mais recentemente as atenções tem sido voltadas às propriedades relacionadas com a dependência temporal nesse tipo de transporte. Um fenômeno interessante nesse contexto é o efeito Bohm-Aharonov. Com o objetivo de estudar a dependência temporal do transporte nesses sistemas calculamos a flutuação na corrente em um anel mesoscópico no regime de transporte balístico, na presença de um campo magnético. Investigamos a dependência da flutuação com a energia de Fermi do sistema, o campo magnético aplicado e a frequência. Representamos o sistema por um Hamiltoniano de ligações fortes e obtemos a corrente e a flutuação na corrente através do cálculo de funções de Green fora de equilíbrio, utilizando o formalismo de Keldysh. O comportamento do "shot-noise" em função do fluxo magnético resultou ser muito sensível aos valores da energia de Fermi e da frequência. Para frequência zero e níveis de Fermi tais que a transmissão é máxima, o ruído em função do campo magnético aplicado apresenta oscilações de período $\frac{\pi}{2h}$, e se anula quando a corrente é máxima. Este comportamento se mantém mesmo para frequências não nulas, desde que ω seja tal que $h\omega$ seja menor do que a diferença de energia entre dois máximos consecutivos da corrente. Tipicamente, para um anel de 1500 Å e energia de Fermi de 5 meV, essas frequências são da ordem de 10^9 Hz. Por outro lado, para energias de Fermi que correspondem a um mínimo na transmitância, as oscilações do ruído com o campo magnético aplicado tem período $\frac{\pi}{h}$, igual ao da corrente.

IMPUREZAS PLANARES EM DIODOS DE BARREIRA DUPLA

CARVALHO, A. R. R. DE; DAVIDOVICH, M. A.

Departamento de Física, PUC-Rio

A presença de impurezas planares em dispositivos de barreira dupla pode modificar de forma significativa suas propriedades de transporte. Fazemos um cálculo auto-consistente da corrente de tunelamento em função da voltagem aplicada a uma estrutura de barreira dupla onde são introduzidos planos de impurezas. O sistema é descrito por um Hamiltoniano de ligações fortes e a corrente é obtida através do cálculo de funções de Green fora de equilíbrio utilizando o formalismo de Keldysh. A distribuição de cargas e o potencial eletrostático ao longo do sistema são calculados de forma auto-consistente. Encontramos que a estrutura eletrônica do sistema depende do grau de interação do nível de impureza com o do poço. O acoplamento é maior quando a energia da impureza está em ressonância com a do poço e quanto mais próximo do poço está o plano de impurezas, localizado nas barreiras. A mudança na estrutura eletrônica tem efeitos importantes na corrente de tunelamento. Tanto a intensidade do pico de corrente quanto a relação pico de corrente/vale de corrente podem ser amplificados ou reduzidos, dependendo da energia e da localização dos planos de impurezas. Nossos resultados sugerem que uma escolha apropriada de impurezas e de sua localização na barreira dupla pode melhorar substancialmente o desempenho de diodos de tunelamento.

DIFUSÕES DE FÓSFORO E ALUMÍNIO EM CÉLULAS SOLARES

ESPINOZA, J. L. U.; MARQUES, F. DAS C.

UNICAMP

A otimização de células solares é um tema que vem recebendo grande atenção dos pesquisadores da área. Os principais objetivos são o de determinar os fatores que limitam a obtenção de eficiências superiores às que são normalmente obtidas, e o de desenvolver técnicas de preparação de células solares de baixo custo para permitir sua produção em escala industrial de forma a torná-las mais competitiva em relação aos processos convencionais de geração de energia elétrica. Neste trabalho apresentamos um estudo que estamos realizando em relação à otimização das difusões de fósforo, para a obtenção dos emissores em células solares, e da difusão de alumínio para a formação de um campo na superfície posterior das células. As células solares foram fabricadas em silício monocristalino tipo-p, com superfície plana ou texturizada, com uma camada anti-refletora de dióxido de estanho depositado pelo método

de spray químico. Em relação às difusões de fósforo investigamos a influência do tempo e da temperatura de recozimento em camadas dopadas com fósforo com diferentes perfis de concentração de fósforo e resistividade de folha. A região dopada com alumínio é muito importante para aumentar a tensão de circuito aberto das células solares. Este efeito é investigado em função da temperatura de recozimento para a formação das ligas de silício-alumínio, responsável pela dopagem tipo-p na região traseira das células solares.

Apoio : SCTDE (SP) e CNPq

CONFECÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE GUIAS DE ONDA EM GaAs/AlGaAs

CAMPOS, J. B. DE

Depto. de Ciência dos Materiais e Metalurgia - PUC/RJ

FORNO, A. DE O. D.; WEID, J. P. V. D.; BASTOS, P. L.; YAVICH*, B.; SOUZA, P. L. DE

Centro de Estudos em Telecomunicações - PUC/RJ

KÖCK, A.

Institut für Festkörper Elektronik - Technische Universität Wien

Os moduladores e chaveadores eletro-óticos, para emprego como elementos discretos ou integráveis com outros dispositivos sobre um mesmo substrato, envolvem a fabricação de guias de onda sobre camadas semicondutoras. Para a obtenção de guias de onda, inicialmente, foram fabricadas linhas do tipo "rib" em substratos de GaAs afim de testar as diversas etapas de processamento: fotografação, revelação dos padrões, "mesa-etching" e metalização. O "rib" assim obtido foi avaliado por microscopia eletrônica de varredura para calibração da velocidade de ataque, verificação da uniformidade do "rib" e qualidade dos perfis das mesas gravadas. Os resultados obtidos mostraram que chegamos a um adequado controle sobre os parâmetros envolvidos no processamento. Numa segunda etapa, aplicamos o mesmo processamento numa estrutura de guia de onda de GaAs/Al_{0.03}Ga_{0.97}As crescida por MOCVD, onde a camada superior, a ser processada, era uma camada de 3 μm de GaAs. As linhas fotogravadas são de 10 μm de largura e 10 mm de comprimento. O resultado foi observado num microscópio eletrônico de varredura. As imagens atestam que todas as etapas do processamento se mostraram adequadas, fornecendo uma estrutura "rib" de excelente qualidade morfológica. Numa última etapa, foi feita uma montagem para caracterização do guia de onda, onde os parâmetros relevantes a serem medidos são: atenuação, eficiência de acoplamento de luz, eficiência de modulação eletro-ótica, características do campo modal, etc. Os resultados obtidos para o guia de onda descrito acima serão apresentados e discutidos. Trabalho realizado sob a égide do contrato PUC-TELEBRÁS No. 513/93. * em licença do A.F.IOFFE - PHYSICO-TECHNICAL INSTITUTE - São Petersburgo - Russia.

A INFLUÊNCIA DE UM CAMPO ELÉTRICO NAS PROPRIEDADES DE TRANSMISSÃO DE BARREIRAS NÃO-ABRUPTAS DE GaAs/Al_xGa_{1-x}As

LIMA, M. C. A.

Universidade Federal do Maranhão

FARIAS, G. DE A.; FREIRE, V. N.

Universidade Federal do Ceará

Propriedades de transmissão são calculadas para barreiras não-abruptas de GaAs/Al_xGa_{1-x}As submetidas a um campo elétrico. O potencial e a massa efetiva dos portadores (elétrons-buracos) nas interfaces são funções espaciais, e são obtidas a partir da hipótese de uma variação linear da fração molar de alumínio nas regiões interfaciais. Expressões analíticas para as matrizes de transmissão são obtidas na aproximação da massa constante na interface, enquanto que a aproximação dos múltiplos degraus de potencial é utilizada quando a massa dos portadores é variável espacialmente nas interfaces. Mostra-se que um aumento da intensidade do campo elétrico aplicado desloca o coeficiente de transmissão de barreiras não-abruptas de GaAs/Al_xGa_{1-x}As para energias elevadas.

Persistent light dependence of the resonant peak position of GaAs/AlAs double barrier devices

NEVES, B. R. A.; ALVES, E. S.; SAMPAIO, J. F.; OLIVEIRA, A. G. DE; MOREIRA, M. V. B.

Departamento de Física, ICEx, UFMG

A novel effect has been observed in the current-voltage characteristics of GaAs/AlAs double barrier resonant tunneling devices under illumination. When a device is biased a resonant peak is found in the current when the energy of the emitter two-dimensional electron gas matches the energy of one of the quasi-bound states in the well. The voltage at which a resonance occurs depends mainly on the well width and on how the applied bias is distributed across the device. We have observed a persistent shift of the peak position when the device is illuminated at low temperatures. As the device is illuminated, the observed voltage shift stays on even after turning light off and the peak only comes back to the observed value at dark condition after raising the temperature to over 150 K. We have carried out magnetotunneling measurements at different temperatures and under different illumination and a charge transfer mechanism is used in order to explain the results.

Condutividade por "Hopping" e transição metal-isolante em amostras com centro DX.

MOREIRA, H. S.; SAMPAIO, J. F. DE; ALVES, E. S.; OLIVEIRA, A. G. DE
UFMG

A condutividade elétrica (σ) de um semiconductor dopado se caracteriza por processos de "Hopping", quando a concentração de dopantes é menor que um valor crítico N_c . Nesta situação a amostra é isolante. Se a concentração de dopantes é maior que N_c , a amostra adquire um regime metálico que pode ser evidenciado em suas propriedades de transporte. As ligas de $Al_xGa_{1-x}As$ dopadas com silício apresentam dois estados, um próximo à banda de condução (nível raso) e outro mais profundo no gap chamado de centro DX. O nível raso é metaestável e seu decaimento para o centro DX depende da temperatura. A 77K o tempo de decaimento é de vários dias. Através de incidência de luz pode-se converter DX em níveis rasos, que são doadores e assim, a condutividade do sistema aumenta. Desta forma, este tipo de material é candidato a sofrer uma transição metal-isolante apenas com a incidência de luz. Neste trabalho apresentaremos resultados experimentais da resistividade da liga $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ dopada com Si, em função da temperatura, para diferentes doses de radiação incidentes sobre a amostra. Uma análise das curvas de resistividade, à luz dos modelos existentes para "Hopping", será mostrada, com o intuito de se determinar a dose crítica de luz que faz com que a amostra mude do regime isolante para metálico.

MAGNETIC-FIELD-INDUCED LOCALIZATION IN A SYSTEM WITH A TWO-DIMENSIONAL ARRAY OF QUANTUM DOTS.

GUSEV, G. M.; LUBYSHEV, D. I.; NASTAUSHEV, Y. V.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

GENNSER, U.; MAUDE, D. K.; PORTAL, J. C.

Service National des Champs Intenses, Centre National de la Recherche Scientifique, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

At zero magnetic field two-dimensional electron system must be localized at sufficiently low temperature and at strong magnetic field B . The Quantum Hall effect is present as an extended system, therefore the magnetic field induces insulator-metal transition at finite B . At higher field Wigner crystallization occurs, when metal regime again cross over to the insulator. However, the system with artificial lateral superlattice allows us to observe trapping of the electron extended trajectories at lower magnetic field.

In this work we report the suppression of the Shubnikov oscillations at high magnetic field in samples with array of connected dots. We measure two samples

with elliptical-shaped antidots arranged in a lattice, when the main axes of these oval antidots are normal to each other. Periodicity of lattice was $1 \mu\text{m}$, the width of the oval antidots $0.1 \mu\text{m}$, the length $0.6 \mu\text{m}$. At low magnetic field we found commensurability oscillations, and Shubnikov oscillations were observed, when sweeping the field up the higher values. At $B > 2$ T Shubnikov oscillations were suppressed and increase in the magnetoresistance with reproducible aperiodic fluctuations were found. We believe that oval antidots capture the electron trajectories. The skipping orbits around antidots are not scattered, therefore electrons don't diffuse through sample at field $B > B_c$ [1], where $B_c = (n_s/4.810^{10})[0.23 \ln(2\pi\rho/\lambda_F)]^{1/2} \lambda_F/\rho$ (1) where n_s -electron density, ρ -radius of the curvature of antidots wall potential, λ_F electron wavelength. We found the value of $B_c = 1.8$ T and 3.8 T for different samples in agreement with formula (1). The nature of the aperiodic fluctuations at high magnetic field was also discussed. This work was supported by FAPESP and CNPq.

1. L.I.Glazman, M.Jonson, J.Phys.Cond.Matter, 1, 5547 (1989).

MODULAÇÃO DO FEIXE DE ELETRONS EMITIDOS DE UM CÁTODO SOB O EFEITO DA AFINIDADE ELETRÔNICA NEGATIVA PELA UTILIZAÇÃO DE ELETRODO INTEGRADO

SANTOS, E. J. P.

UFPE

MACDONALD, N. C.

Cornell University

Demonstramos que é possível modular o feixe de elétrons emitidos por um cátodo sob o efeito da afinidade eletrônica negativa. A modulação é obtida pela utilização de um eletrodo integrado à superfície do cátodo. Anteriormente [Edval J. P. Santos e Noel C. MacDonald, IEDM Technical Digest, pp.743-746, 1992], nós havíamos demonstrado que é possível se obter emissão de elétrons a partir de áreas litograficamente selecionadas de uma lâmina de p^{++} -GaAs. Nesse trabalho o processo é estendido para se fabricar eletrodos integrados ao cátodo. Após a fabricação do cátodo, ele é instalado em uma câmara de ultra alto vácuo ($< 2 \times 10^{-10}$ torr) para que os contaminantes da superfície sejam removidos (desorção) e as áreas litograficamente selecionadas sejam ativadas na condição da afinidade eletrônica negativa. Para se obter o efeito da afinidade eletrônica negativa é necessário depositar camadas de césio e oxigênio sobre a superfície limpa na câmara de ultra alto vácuo. Os elétrons emitidos foram projetados em uma tela de fósforo. Exemplo de feixe

modulado, medição de estabilidade e a técnica desenvolvida para reativar os cátodos, também serão apresentados. Resultados da simulação do desempenho do eletrodo serão apresentados e discutidos.

CINÉTICA DE CRESCIMENTO DE FILMES DE SiO_2 TÉRMICO

GOMES, M. A. F.; JÚNIOR, E. F. DA S.; AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

A cinética de crescimento de filmes finos de óxido de silício (SiO_2) em altas temperaturas em substratos de silício cristalino, tem sido objeto de intenso estudo nos últimos 30 anos. Entretanto os inúmeros modelos teóricos até o presente não têm tido sucesso em explicar auto-consistentemente todos os resultados experimentais para a cinética de crescimento, quando se leva em conta filmes crescidos nos diversos regimes temporais de oxidação; tempos muito curtos, tempos intermediários e tempos longos. Neste trabalho, apresentamos um novo modelo para a cinética de crescimento de filmes de SiO_2 , no qual a espessura (x) do óxido depende do tempo de oxidação (t) através de uma lei de potência do tipo $x = at^b$. Os valores do expoente b variam na faixa $0.5 \leq b \leq 1$ dependendo do intervalo de tempo decorrido durante o processo de oxidação e da espessura final do filme de SiO_2 . Neste modelo a constante a está associada à difusão das espécies oxidantes, ao número de sítios disponíveis e à taxa de reação química na interface SiO_2/Si . Os resultados preditos pelo modelo estão em concordância com dados experimentais obtidos nos últimos 30 anos, e englobam processos de oxidação em temperaturas na faixa de $800-1200^\circ C$ e para pressões de O_2 entre 10^{-4} e $20 atm$.

AVALANCHE MAGNÉTICA (MAGNETIC BREAKDOWN) EM SUPER-REDES SEMICONDUTORAS DE CURTO PERÍODO

HENRIQUES, A. B.; BINDILATTI, V.; OLIVEIRA JR, N. F.; SHIBLI, S. M.

Instituto de Física da USP, C.P.20516, 01498-970 São Paulo, SP

A estrutura eletrônica da banda de condução de $GaAs$ com dopagem periódica de Si foi estudada por medidas de Shubnikov-de Haas em campos de intensidade 0-14 Tesla. As amostras possuíam vários períodos de dopagem, a , cobrindo um intervalo de 40Å até 1000Å . A densidade planar de portadores, por período da super-rede, era de aproximadamente $2.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ em todas as amostras. O período de dopagem variável permitiu estudar a evolução da estrutura eletrônica desde poços isolados até sistemas efetivamente tridimensionais. Em sistemas intermediários entre tri-

e bi-dimensionais, para um campo magnético aplicado no plano dos dopantes, observou-se a ocorrência do fenômeno de *avalanche magnética* (magnetic breakdown). Para $a=170\text{Å}$, um forte sinal atribuído ao efeito de magnetic breakdown entre a primeira ($E1$) e a segunda ($E2$) minibanda eletrônica é observado. Ao ser aumentado o período de dopagem, este sinal é progressivamente enfraquecido, e para $a=400\text{Å}$, o efeito de magnetic breakdown entre as minibandas $E1$ e $E2$ já não é detectado. Porém, nesta amostra surge um forte sinal de magnetic breakdown entre as minibandas $E2$ e $E3$, que por sua vez também é enfraquecido quando o período de dopagem é aumentado ainda mais.

Difusão Térmica Rápida de Sn e Zn em GaAs a Partir de Filme SOG

HERNANDES, C. S.; SWART, J. W.

LPD/IFGW e DSIF/FEE da UNICAMP

SHACHAM-DIAMOND, Y.

School of Electrical Engineering at Cornell University

SANTOS, T. E. A.

LPD/IFGW e DSIF/FEE da UNICAMP

Filmes tipo *Spin on Glass* (SOG) obtidos por transformação SOL-GEL têm várias aplicações em processos de microeletrônica. Uma destas aplicações é como fonte de difusão. Nós realizamos difusões de Sn e Zn em GaAs a partir de fontes SOG preparadas no nosso laboratório. Como precursores usamos TEOS e H_2O e difusão em etanol. Após aplicação e cura dos filmes, realizamos a difusão em forno RTP. Em seguida caracterizamos as camadas difundidas por medidas de efeito Hall e por C-V eletroquímico (Polaron). Observamos que o uso de ambiente de sobre-pressão de As durante o recozimento tem um efeito de retardar a difusão. Este efeito pode ser explicado pelas reações que ocorrem entre o SiO_2 e o GaAs, as quais tendem a cessar quando houver alta concentração de As no ambiente. Mostramos que junções n^+ e p^+ rasas com alta concentração superficial de dopantes podem ser obtidas, dependendo das condições de recozimento. Estes tipos de camadas são importantes para dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos modernos de reduzidas dimensões.

SELF-CONSISTENT LO-PHONON FIELD AND SOUND EMISSION IN A DOUBLE BARRIER RESONANT TUNNELING DEVICE (DBRTD)

PASTAWSKI, H. M.

LaNAIS de RMN (CONICET) - FaMAF, Universidad Nacional de Córdoba

MAKLER, S. S.; ANDA, E. V.

UFF

In a DBRTD polarized by a voltage energy eV , the electronic tunneling through the well resonant state E_0 can be assisted by emission of LO-phonons with energy $\hbar\omega_0$

provided that that emitter's electrons have a longitudinal kinetic energy $E_k = E_0 + \hbar\omega - eV/2$. We show that the emission is strongly favored if the escape rates through the emitter (A) and the collector (B) are the same: $\Gamma_A(E_0 + \hbar\omega - eV/2) = \Gamma_B(E_0 + eV/2)$. This can be achieved using a wide collector's barrier. Because of their finite life-time in the well, optical phonons stimulate further emission (SASER effect). We calculate self-consistently the phonon population and the electric current with Generalized Landauer- Büttiker Equations (GLBE) from which we obtain a rate equation for the phonon field. The total sound power is evaluated for typical devices.

Relaxation of electrons in one-dimensional nanostructures at low temperatures

CAMPOS, V. B.

Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, S.P.

SARMA, S. DAS

Department of Physics, University of Maryland, College Park, MD, USA

We have developed a theory for the energy loss rate of warm one-dimensionally confined electrons in GaAs quantum wires, due to acoustic-phonon emission via the deformation potential coupling. We have considered low electron temperatures, so that acoustic phonon emission is the only important dissipative process. The electron temperature model is assumed, describing the electron gas by a Fermi distribution function at a temperature $T_{el} > T_{lat}$. We consider only intrasubband relaxation within the lowest subband, neglecting by now the effects of higher subbands in our calculation. Two different confinement phonon models were considered: the usual (3D) bulk-phonon model, which is appropriate for electron gas strongly coupled to the substrate lattice; and the one-dimensionally confined phonon model, representing free standing quantum wires. In both cases the electrons are confined to the quantum wire. We compare the results for the power loss via acoustic phonon emission with those previously obtained for LO-phonon emission, which is more important for temperatures above 30K. The most spectacular feature of 1D thermal relaxation is an exponential temperature dependence of the power loss at the lowest electron temperatures, in contrast to the well-known Bloch-Grüneisen algebraic temperature dependence in higher dimensions. This arises from the dominance of $2k_F$ -scattering at very low temperatures. Also, the temperature dependence of the power loss is rather strongly density dependent and remains qualitatively unaffected by electronic screening in one dimension, what differs from the two and three dimensional systems. The magnitude of the one-dimensional power loss is comparable to that in 2D heterostructures except at the lowest temperatures, where the 1D power loss is exponentially suppressed.

ESPECTROSCOPIA MODULADA POR CAMPO ELÉTRICO EM "QUANTUM DOTS" DE CdTe

PRADO, F. M.; OLIVEIRA, C. R. M. DE; CESAR, C. L.; BARBOSA, L. C.; MEDEIROS NETO, J. A.
IFGW - UNICAMP

Apresentamos medidas de espectroscopia modulada por campo elétrico em vidros dopados com microcristalitos de semicondutores (CdTe.) Microcristalitos menores que 10nm apresentam efeitos de confinamento quântico tri-dimensional. Uma técnica importante para a caracterização deste tipo de amostra é espectroscopia modulada por campo elétrico, que consiste basicamente em observar variações na transmissão de luz pela amostra devido a aplicação de um campo elétrico modulado. A ação de um campo elétrico neste tipo de amostra pode levar a quatro efeitos: 1-perda da força do oscilador; 2-alargamento dos níveis; 3-deslocamento dos níveis de energia e 4-quebra da regra de seleção para transições ópticas entre os níveis de energia. Estamos interessados no efeitos 2,3 que nos permitem examinar melhor as estruturas do confinamento quântico nestes "Quantum Dots" e no efeito 4 que exhibe transições antes proibidas. Estes efeitos são observados no espectro de absorção da seguinte forma: 1-perda da força do oscilador: a linha de absorção diminui sua área, sem porém deslocar-se ou alargar-se -seu espectro diferencial é simplesmente o próprio reduzido por um fator α ; 2-alargamento: a linha de absorção alarga-se sem deslocar-se, e a diferença entre os dois espectros (com campo-sem campo) é o equivalente a tirar a segunda derivada da curva de absorção sem o campo; 4-quebra da regra de seleção: nos "Quantum Dots" sem campo elétrico só são permitidas as transições ópticas que levam dos níveis (HH_j , LH_j , SO_j) para e_j , onde $j=1,2,3,\dots$ e HH =Heavy Hole, LH =Light Hole, SO =Split Off (a integral de overlap das funções de onda do buraco e do elétron é diferente de zero). Aplicando um campo elétrico variável podemos alterar esta lei, passando a ter transições entre $LH1$ e $e2$, por exemplo. Isto aparece no espectro diferencial como uma curva simétrica.

RESISTÊNCIA NEGATIVA EM UM POÇO QUÂNTICO DUPLO ASSIMÉTRICO.

FERREIRA, J. V. B.; SOUZA, M. A. R.; LEÃO, S. A.; DEGANI, M. H.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos

Um estudo sistemático das propriedades eletrônicas de um sistema constituído por um poço quântico duplo assimétrico de $GaAs$ e $Al_xGa_{1-x}As$, com dopagens deltas em diversas posições, é realizado. As equações de Schrödinger e Poisson são resolvidas autoconsistentemente para calcularmos a curva característica da corrente transversal a direção de crescimento da amostra versus voltagem, aplicada na direção de crescimento

(ddp aplicado no gate). Através do tunelamento ressonante entre os poços, o qual é controlado pela voltagem aplicada no *gate*, é possível encontrarmos resistência negativa. Este efeito indica uma aplicação em potencial da estrutura proposta para *switching devices* onde a condutividade transversal pode ser controlada pelo acoplamento entre os estados dos poços. Os parâmetros posição e largura dos poços e posição são ajustados até se obter um máximo efeito de resistência negativa.

INTERNAL AND EXTERNAL PROXIMITY EFFECTS IN A FOCUSED ELECTRON-BEAM NANOLITHOGRAPHY

SILVA, M. DE A. P. DA; ROSSI, J. C.; BASMAJI, P.; AEGERTER, M. A.

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP

NASTAUSHEV, Y. V.; GUSEV, G. M.
INSTITUTE OF SEMICONDUCTOR PHYSICS,
RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCE, SIBERIAN
DIVISION

The main problem of electron-beam nanolithography is the "proximity effect". There is a fundamental physical reason for this effect: the scattering of electrons in the resist and the backscattering of electrons from the substrate during the resist exposure. The integration of microdevices, prepared by means of the electron-beam lithography is limited by the external proximity effect, caused by the additional exposure of the gaps between neighbor elements of topology by the scattered electrons. The exposure of the resist is made by scattered in the resist secondary "warm" electrons with an energy enough for the solid state defects preparation. Because of it the removing of the thick substrate and evaluation of the electron-beam energy can not improve the resolution of resist. In this work we have investigated the proximity effects in the process of quantum anti dots preparation on GaAs layer grown by MBE. We have used the electron beam lithography system with a minimum beam diameter 7nm, beam energy 30kV. It was changed the thickness of PMMA-resist in the region 100-500nm. It was investigated the resolution (minimum diameter of dots) and integration scale (the minimum period of dots). We have prepared a single isolated dot with the minimum diameter near 54nm on the resist with a thickness 500nm at dosage per point 18.7fC. In the scanning direction can be changed the circular shape of anti dots to ellipsoidal shape. We began to find the parameters, that modify the sensitivity waves in the resist such as beam current, period of antidots. This work was supported by FAPESP and CNPQ.

GANHOS DE MOBILIDADE DE PORTADORES DE CARGA PELA DIMINUIÇÃO DE DESORDEM DE LIGA.

MOREIRA, M. V. B.; OLIVEIRA, A. G. DE
Depto. Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

Py, M. A.

Institut for Micro- and Optoelectronics, Swiss Federal Institute of Technology, CH-1015, Lausanne, Switzerland.

Neste trabalho, apresentamos resultados experimentais para estruturas do tipo MODFET utilizando canal de SPS de $(\text{InAs})_m(\text{GaAs})_n$. Estes resultados são comparados com os resultados de estruturas utilizando a liga para formar o canal. As amostras foram crescidas por MBE sobre substratos de GaAs (001) em condições de crescimento otimizadas. As variáveis de crescimento foram a concentração de índio e a espessura do canal. A dependência da mobilidade em função da concentração de portadores no canal foi obtida a 77 K fazendo a concentração de portadores variar pela utilização de um LED (emitindo no vermelho) para iluminar as amostras. Os portadores são fotogerados a partir de uma camada de AlGaAs dopada com silício e localizada próxima do canal de condução. Nossos resultados indicam que para concentrações de índio de 8-9%, as propriedades elétricas para estruturas com canal de SPS ou de liga são equivalentes. Para maiores concentrações de In (25-26%) as propriedades elétricas para as estruturas com canal de SPS são diferentes. Para uma mesma concentração de portadores, obtivemos um aumento de 35% na mobilidade eletrônica para a amostra com canal de SPS se comparada com a amostra com canal feito com a liga. Os resultados indicam que, na faixa de concentração de In utilizada em nossas amostras, o espalhamento associado à desordem da liga cresce com a concentração do índio. A conclusão foi de que a mobilidade pode ser melhorada quando efeitos de desordem de ligas é eliminado o que pode ser conseguido substituindo a liga por uma superrede de componentes básicos: GaAs, InAs.

Correções Quânticas na Magnetocondutividade de GaAs com Dopagem Planar de Si

MEDEIROS, S. M.; GUIMARÃES, P. S. S.; SAMPAIO, J. F.; OLIVEIRA, A. G. DE

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

No estudo dos processos de condução elétrica em sistemas semicondutores desordenados em baixa temperatura é essencial considerar correções quânticas devido à fenômenos tais como localização fraca e interação elétron-elétron. A localização fraca é um fenômeno puramente quântico originado pela interferência entre as funções de onda eletrônicas espalhadas pelas impurezas presentes no sistema. A interação elétron-elétron depende fundamentalmente da concentração de

elétrons livres presentes e pode levar a mudanças significativas na condutividade elétrica. A destruição destas correções quânticas pela aplicação de um campo magnético externo resulta em uma magnetoresistência negativa, ou seja, um aumento na condutividade com o campo magnético. Apresentamos neste trabalho medidas de magnetotransporte em campos até 17 Tesla em amostras de GaAs com dopagem planar de Si. São estudadas várias amostras, com a concentração de elétrons no poço quântico quasi-bidimensional formado pela dopagem planar variando de $0,8$ a $18 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. As medidas revelam uma acentuada magnetoresistência negativa que pode ser ajustada com a teoria de localização fraca. As medidas da magnetoresistência para as amostras no limite inferior de dopagem apresentam mu-

danças significativas com a intensidade de iluminação. Estas mudanças não podem ser explicadas pela teoria de localização fraca. O aumento do número de portadores de carga gerado pela iluminação sugere que um termo devido à interação elétron-elétron deve ser acrescentado na expressão para a condutividade elétrica.

Defeitos, Estrutura Eletrônica e Estrutura de Bandas (SEM) – 09/06/94

Surface Roughening and the Relaxation of Strained Layers

TERSOFF, J.

IBM Watson Research Center, Yorktown Heights NY 10598 USA

Early analyses of relaxation in epitaxial strained layers focused on the equilibrium density of dislocations. However, with improved substrates and lower growth temperatures, the density of dislocations is typically kinetically limited, and pseudomorphic films can be grown far beyond the equilibrium critical thickness. Recent interest has therefore focused on the kinetics of relaxation. Unfortunately, little is known about the nucleation of dislocations. But it is known that strained layers are unstable against morphological changes such as rippling or island formation, and that dislocations could nucleate at such surface roughness. The current challenge is to understand whether and when this could be the actual mechanism by which strained layers relax. I will show that strain-induced surface roughening is activated, with a barrier which scales with misfit ϵ as $\epsilon_{sup} - 4$. In contrast, other mechanisms typically give barriers which scale as $\epsilon_{sup} - 1$ or even more weakly. As a result, nucleation of dislocations via surface roughening should dominate for large misfit. For small misfit, other mechanisms should dominate, relaxing the strain before the surface has time to roughen. The latter situation is clearly preferable in most applications, since it permits growth of subsequent layers with smooth interfaces. Experimental results of F. K. LeGoues and P. M. Mooney for SiGe alloys on Si confirm the occurrence of such a crossover with increasing misfit. Both the change in the barrier, and the change in the surface roughness, have been clearly observed. For forcing relaxation to occur at the smallest possible misfit, compositional grading is one strategy for avoiding surface roughening. In addition, the barrier for surface roughening is very sensitive not only to the misfit, but also to the anisotropy of the surface energy, which depends on the temperature and on the structure of the surface. Thus this mode of relaxation can be drastically affected by either changing the growth temperature, or using a surfactant during growth.

Estrutura Eletrônica das Superfícies II-VI (110)

ALVES, J. L. A.

Fundação de Ensino Superior de São João del Rei - DCNAT

WATARI, K.; FERRAZ, A. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

A estrutura eletrônica e o caráter dos estados de superfície foram determinados para as superfícies (110) dos compostos ZnS, ZnSe e ZnTe, usando o método "ab-initio" de dinâmica molecular originalmente desenvolvido por Car e Parrinello. As interações elétron/ion foram tratadas através de pseudopotenciais não locais com conservação da norma, na forma de Kleinman-Bylander, e as interações de muitos corpos elétron-

elétron foram tratadas dentro da aproximação de densidade local e esquema de Ceperley-Alder. Geramos desta forma um pseudopotencial para o átomo de zinco mantendo seu orbital 3d como estado de caroço e fazendo uma escolha adequada para a configuração eletrônica e de raio de corte, capaz de reproduzir constantes estruturais experimentais. A superfície é então simulada considerando-se uma supercélula ao longo da direção (110) contendo oito camadas dos compostos II-VI mais uma região de vácuo equivalente a seis distâncias inter-planares. Este trabalho faz parte de um estudo sistemático das superfícies livres dos semicondutores II-VI, complementando trabalhos anteriores de relaxação da rede e estrutura dos níveis eletrônicos na região da faixa proibida. Agora, todos os estados de

valência de cátions e ânions são determinados e caracterizados, principalmente aqueles mais profundos relacionados ao *gap* heteropolar, tendo em vista resultados experimentais recentemente obtidos através de medidas de fotoemissão.

Simulação Configuracional e Estrutura Eletrônica de Semicondutores Amorfos

VENEZUELA, P.; CANUTO, S.; FAZZIO, A.
USP

Apresentaremos resultados de simulação estrutural realizadas com o Método Monte-Carlo (MC) e cálculos de estrutura eletrônica para o Silício Amorfo (α -Si) e Carbetto de Silício Amorfo (α -SiC). As simulações de MC foram realizadas em células cúbicas de 216 átomos com condições periódicas de contorno. Os átomos interagem através do potencial interatômico de Tersoff. Com as configurações obtidas para o α -Si e o α -SiC calculamos as funções de distribuição radial, funções de distribuição angular e coordenação dos átomos. Estes resultados estão em excelente concordância com os experimentos. Configurações obtidas da simulação são utilizadas para um cálculo quântico de estrutura eletrônica. Utilizamos o Método Semi-Empírico INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap) com Interação de Configurações (CI) para calcular densidades de estado e espectroscopia de absorção da radiação eletromagnética. Tal estudo objetiva em grande parte a obtenção do espectro de absorção de impurezas em semicondutores amorfos.

EFEITOS DE ESCALA DE TAMANHO FINITO EM CÁLCULOS DE SUPER-CÉLULAS: TRANSIÇÃO GAP DIRETO-INDIRETO EM $Al_xGa_{1-x}As$.

CAPAZ, R.

MIT

KOILLER, B.

PUC - Rio de Janeiro

O critério usual para a identificação da transição na natureza ótica do *gap* da liga desordenada $Al_xGa_{1-x}As$ quando a concentração de Al aumenta refere-se ao cruzamento de estados de simetria Γ e X na banda de condução. O *gap* passa de direto para indireto para $x > x_c$. Tal critério baseia-se na hipótese de que a simetria dos estados na liga permanece essencialmente inalterada com relação à dos constituintes binários, AlAs e GaAs, sendo o efeito da liga apenas o de modificar a posição relativa entre eles. Como a liga desordenada não apresenta simetria de translação, a classificação de seus estados segundo as simetrias da estrutura *zinc-blende* deve ser encarada como uma aproximação do tipo cristal-virtual. Desenvolvemos um formalismo alternativo para o tratamento da desordem em ligas semicondutoras que não se baseia em associar ou projetar estados segundo as simetrias *zinc-blende* (Brazilian

Journal of Physics 23, 161 - 1993). Diferentes configurações atômicas do sistema, acomodadas num microcristal de tamanho L^3 , são geradas e resolvidas independentemente. Propriedades da liga são associadas a uma média estatística sobre as obtidas para as diferentes configurações. Neste trabalho apresentaremos um estudo da dependência das propriedades calculadas para ligas de $Al_xGa_{1-x}As$ com o tamanho da célula de simulação L . Realizamos cálculos em microcristais contendo até 8000 átomos. O comportamento de escala das propriedades óticas com L permite a determinação precisa da concentração crítica x_c , cujo valor está em excelente acordo com medidas experimentais. A lei de escala é compatível com uma transição descontínua na natureza do *gap* em x_c . Cálculos na aproximação de cristal virtual serão também apresentados para comparação.

DX-CENTER-INDUCED NEGATIVE PERSISTENT PHOTOCONDUCTIVITY IN SILICON PLANAR-DOPED GaAs

CHAVES, A. S.; CHACHAM, H.; MAZZONI, M. S. C.; SOARES, D. A. W.; RIBEIRO, G. M.; OLIVEIRA, A.

G. DE

UFMG

The photoconductivity of silicon planar-doped GaAs was investigated in a series of ten samples with sheet silicon concentration varying in the range of 1.4 to $88 \times 10^{12} cm^{-2}$. For $N_{Si} = 1.4 \times 10^{12} cm^{-2}$, positive photoconductivity was observed. For $N_{Si} \geq 3.4 \times 10^{12} cm^{-2}$, negative persistent photoconductivity (NPPC) was observed with recovering times of the order $10^3 - 10^4 s$, after a transient of positive non-persistent photoconductivity. The temperature dependence of the NPPC effect was also investigated. The results are explained in terms of photo-induced occupation of the DX^- states in the energy range between E_F and $E_F + \hbar\omega_{LO}$. Electronic structure calculations were performed, in the effective mass approximation, assuming the above model. The calculations reproduce the main features of the experimental results.

Quantum Chaos and Universal Statistical Properties of Electronic Band Structures

MUCCILOLO, E. R.; CAPAZ, R. B.; SIMONS, B. D.;

ALTSHULER, B. L.; JOANNOPOULOS, J. D.

Massachusetts Institute of Technology, Cambridge

Crystalline materials are among the most widely studied systems in physics and much has been learned from the regularity of their band structures. Despite that, the classical version of a crystal is a good example of a nonintegrable billiard. For instance, a complex unitary

cell can be viewed as set of scattering centers of different size and hardness, and therefore should yield some kind of chaotic behavior. In this work we show that quantum chaos manifest itself even in semiconductors with a rather simple unitary cell. We analyze the *ab initio* band structure of silicon and the tight-binding energy spectrum of the alloy $Al_xGa_{1-x}As$, and show that some of their statistical properties obey universal predictions of quantum chaos based on Gaussian ensembles, provided that we avoid the symmetry lines of the Brillouin zone. Interpreting Bloch momenta as external parameters of a single-particle Hamiltonian, we investigate a correlation function recently introduced by Simons, and

coworker. We also discuss the existence of two distinct classes with respect to time-reversal symmetry (orthogonal and unitary) which arise in the context of band structures.

Workshop: Óptica Não-Linear: Semicondutores (SEM, OTI) – 09/06/94

PROCESSOS ULTRARÁPIDOS EM SEMICONDUTORES ESTUDADOS COM LASERS DE FEMTOSSEGUNDOS.

CRUZ, C. H. DE B.

Instituto de Física, Unicamp

O estudo de processos ultrarápidos em semicondutores teve grande avanço na última década com o advento de lasers com pulsos de duração de femtossegundos. Os processos de espalhamento sofridos por portadores fotoinjectados acontecem tipicamente em escalas de tempo inferiores a 300 femtossegundos, podendo chegar a menos de 20 femtossegundos no caso de interações entre portadores a altas densidades. Processos que envolvem apenas portadores virtuais podem apresentar tempos de resposta desprezíveis, mesmo numa escala de tempo de alguns femtossegundos, sendo o principal exemplo desta categoria o Efeito Stark Óptico. Tanto do ponto de vista de física fundamental, como do ponto de vista de aplicações à eletrônica e comunicações o interesse nos processos ultrarápidos em semicondutores continua intenso.

Nesta apresentação discutiremos tres exemplos de medidas ópticas com resolução de femtossegundos em semicondutores:

- a medição do tempo de espalhamento entre vales da banda de condução para elétrons fotoinjectados em filmes de ligas de $AlGa_{0.52}As_{0.48}$. A partir destas medidas obtivemos o valor do tempo de espalhamento entre os vales Γ e X , $\tau_{\Gamma-X} = 120$ fs;
- o estudo da dinâmica do Efeito Stark Óptico em vidros dopados com nanocristalitos de CdS_xSe_{1-x} . Os resultados, medidos com uma resolução de 15 fs, apontam para uma resposta praticamente instantânea do deslocamento da banda;
- a observação de relaxação de buracos em pontos quânticos de CdTe numa matriz vítrea, cujos resultados podem ser interpretados em termos da relaxação de buracos entre os níveis originados da banda de valência devido ao efeito de confinamento quântico. Esta relaxação ocorre numa escala de tempo de 30 fs.

O FUTURO DA FOTÔNICA

FRAGNITO, H.

Instituto de Física, UNICAMP, C.P. 6165, 13083-970, Campinas, SP

Na opinião de muitos especialistas das mais diversas áreas, estamos evoluindo para a nova era: a era da informação, viabilizada pela fusão das tecnologias de comunicações e computação. A fotônica irá ter um papel importante tanto na transmissão como no processamento da informação. Nas próximas décadas esperamos a implantação de redes ópticas com capacidade para transferir dados, imagem e som entre mais de um bilhão de usuários. Para processar a enorme quantidade de informação que será disponível na rede, os computadores deverão ter enorme capacidade de armazenamento e alta velocidade de processamento. Os circuitos dos computadores de hoje serão contaminados gradativamente com chaves eletro-ópticas, interconexões ópticas e dispositivos de óptica integrada para a comunicação entre chips e memórias ópticas de alta densidade; eventualmente os dispositivos fotônicos substituirão os

eletrônicos, do mesmo modo que os eletrônicos substituíram os eletromecânicos no passado. Apresentamos uma revisão geral dos avanços recentes da fotônica e, a partir destes, especularemos sobre o desenvolvimento futuro e quais tópicos da pesquisa básica do presente tornarão possível este desenvolvimento. Dedicaremos especial atenção às tendências na área de comunicações ópticas de altas taxas. Arriscaremos previsões sobre como serão as comunicações no futuro, e que tipo de dispositivo laser, chaves eletro-ópticas e totalmente ópticas serão possíveis nas próximas décadas. Mostraremos que o desenvolvimento das comunicações e da informática dependerá fortemente dos resultados da pesquisa básica de novos materiais óptica não linear.

Estrutura Eletrônica, Bandas, Defeitos e Fónons (SEM) - 09/06/94

ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS SEMICONDUCTORES PbTe, PbS E PbSe.

VALDIVIA, J. A.; BARBERIS, G. E.
Universidade Estadual de Campinas

Este trabalho apresenta a estrutura de bandas e a densidade de estados eletrônicos para os sais de chumbo PbTe, PbS e PbSe, usando o método de Combinação Linear de Orbitais Atômicos parametrizado de Slater e Koster com a base de Vogl sp^3s^* ; nós temos substituído os orbitais atômicos puros por orbitais ortogonalizados com conservação de simetria, segundo o processo de Löwdin. O cálculo é feito considerando-se apenas primeiros vizinhos e o pseudo-hamiltoniano que resulta de considerar os termos de ortogonalização no hamiltoniano relativista de Pauli. O cálculo de densidade de estados é feito usando a divisão em tetraedros da Zona de Brillouin Irredutível e uma interpolação linear dentro dos tetraedros. Os resultados mostram que com este simples modelo, que gera uma matriz 20 x 20 e treze parâmetros ajustáveis, é possível reproduzir aceitavelmente as bandas de valência e as primeiras bandas de condução obtidas por cálculos relativistas de Pseudopotenciais Empírico local.

ESTUDO DA ENERGIA DE STRAIN E DISTORÇÃO DA REDE NOS SISTEMAS DE IMPUREZA ISOVALENTE GaAs:P E GaAs:Sb.

MUÑOZ, W. O.; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

No modelo VFF (valence force field - Keating Model) as forças interatômicas em cristais tetraédricos são expressadas em termos de forças elásticas entre ligações próximas associadas as constantes de ligação "bond bending" e "bond stretching". Utilizando esta teoria foram estudadas as impurezas isovalentes de fósforo (P) e antimônio (Sb) em um cristal hospedeiro de arseneto de gálio (GaAs), simulado por uma supercélula de 64 átomos. Neste procedimento, substituímos o átomo central da supercélula (As) pela impureza (P,Sb) e fizemos um cálculo da energia de "strain" considerando

inicialmente fixas as posições de todos os átomos da estrutura e posteriormente descongelamos sucessivamente o átomo central e as diferentes camadas de vizinhos em volta deste. A distorsão da rede foi então observada pela variação das distâncias das ligações e dos ângulos entre as diferentes ligações tetraédricas dos átomos. Nossos resultados mostram uma energia de "strain" de $E_s = 0.0486$ (eV/cel.prim.) para GaAs:P e de $E_s = 0.1922$ (eV/cel.prim.) para GaAs:Sb, nos sistemas relaxados. Observamos ainda que as distâncias de ligação e seus ângulos exibem uma variação que mostra uma distorsão da rede simétrica em volta das impurezas, sendo importante até os terceiros vizinhos.

THEORY OF THE NEGATIVE PERSISTENT PHOTOCONDUCTIVITY IN SILICON PLANAR-DOPED GaAs

MAZZONI, M. S. DE C.; CHAVES, A. S.; CHACHAM, H.
UFMG

We perform electronic structure calculations for the recently observed phenomenon of negative persistent photoconductivity (NPPC) in silicon planar-doped GaAs. The calculations are performed within the effective mass approximation. The non-parabolicity of the lowest conduction band is taken into account. We simulate samples on the dark and under illumination. For the samples under illumination, we assume that the DX^- states in the energy range between E_F and $E_F + \hbar\omega_{LO}$ are occupied. The energy position of the DX^- state and the silicon doping profile are used as parameters to fit the experimental results. We are able to reproduce the NPPC effect quantitatively. The dependence of the 2D electron density with temperature, both in the dark and under illumination, is also reproduced.

ENTALPIA DE FORMAÇÃO E ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SUPER-REDES ULTRAFINAS DE III-V/IV.

CASAGRANDE, D.; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Realizamos neste trabalho, investigações teóricas de relaxação atômica e estados eletrônicos nas Super-Redes (SRs) de camadas ultrafinas ($n \leq 3$) de $(GaP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$ e $(InP)_n(Ge_2)_n/(Si_2)_n$ consi-

derando cristais com crescimento nas direções [001] e [110]. Os cálculos são baseados na teoria do Funcional-Densidade, com aproximação local para a função de correlação-troca e formalismo de pseudo-potencial "ab-initio" autoconsistente. As posições atômicas foram ainda relaxadas, de acordo com a força existente nos átomos, utilizando o método "optimized steepest descent" acoplado ao método de Car-Parrinello. A entalpia de formação e estrutura de faixas de energia das SRs polares e não-polares são discutidas em termos dos diferentes arranjos espaciais dos "nonocted wrong-bonds" nas interfaces. A interface não-polar ([110]) foi encontrada como sendo mais estável do que a interface polar. Foram ainda analisadas as mudanças ocorridas nas faixas de energia das SRs em relação à mudança estrutural, período da SR e direção de crescimento.

OBSERVATION OF BULK ARSENIC ANTISITE DEFECTS IN GaAs BY STM: AB INITIO AND TIGHT-BINDING CALCULATIONS

CAPAZ, R.; CHO, K.; JOANNOPOULOS, J.
Department of Physics - MIT

It has been recently demonstrated¹ that scanning tunneling microscopy (STM) can be a powerful tool in the study of bulk semiconductor defects, in particular arsenic antisite defects in GaAs. In this work, we report *ab initio* and tight-binding electronic structure calculations of arsenic antisite defects in the vicinity of the GaAs(110) surface. Our *ab initio* calculations are based on the local density functional, pseudopotential and supercell approximations, with preconditioned conjugate gradients scheme for the electronic energy minimization to the Born-Openheimer surface. Simulated STM images and charge density contours reveal that antisite defects as deep as four atomic layers into the bulk can still be detected by STM, in agreement with experiment. A tight-binding study in a larger unit cell reveals satellite STM peaks about 15.2 Å from the defect core, as observed experimentally.

1. R.M.Feenstra, J.M.Woodall, and G.D.Pettit, Phys. Rev. Lett. **71**, 1176 (1993).

Dependência da Estrutura Eletrônica de Semicondutores II-VI com a Pressão Hidrostática e Estudo das Fases Zinc-Blend e Wurtzita.

MIOTTO, R.; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

O recente interesse no estudo da dependência das energias de transição óptica em semicondutores sobre pressão hidrostática ocorre principalmente porque os

dados experimentais da equação de estado não apresentam boa concordância entre si. A avaliação do potencial de deformação hidrostático é de grande importância, já que este potencial está relacionado diretamente a dependência da largura da faixa proibida com a pressão e consequentemente à condutividade e as mudanças do parâmetro de rede devido à dopagem. As estruturas cristalinas "Zinc-Blend" (ZB) e "Wurtzita" (W) são as mais comuns para os semicondutores binários. Apesar de sua estrutura diferente (cúbica e hexagonal) a diferença estrutural entre elas é sutil. Dependendo dos detalhes de crescimento, semicondutores binários como CdS e ZnS, podem ser preparados a pressão ambiente em ambas as formas, entretanto, apesar destas similaridades entre W e ZB, suas características espectroscópicas podem ser bastante diferentes, evidenciando o interesse em aplicações ópticas dos semicondutores do grupo II-VI. Neste estudo de primeiros princípios utilizamos a teoria de funcional densidade, descrito em ondas planas e os mais recentes pseudopotenciais não locais de Troullier e Martins, para átomos com orbitais d na região de valência. Determinamos, assim, as variações dos níveis eletrônicos dos cristais ZnX e CdX (X=O, S, Se, Te) com a pressão, bem como estudamos o comportamento do bulk modulus e parâmetro de rede com a base de ondas planas do modelo. Estes resultados são então comparados com os obtidos através dos consagrados pseudopotenciais de Bachelet, Hamann e Schluter, Hamann, Schluter e Chiang e Vanderbilt, bem como com dados experimentais.

Estudo da estabilidade em ligas III-V

MIWA, R. H.; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Usando o modelo de "valence force field" (VFF), nós obtivemos através do empilhamento de planos na direção [001], estruturas de super-redes (SR) intercalando ligas com material puro. As estruturas estudadas foram: $(Ga_xIn_{1-x}As(P))_n(GaAs(P))_n$ e $(Ga_xIn_{1-x}As(P))_n(InAs(P))_n$ para $x=0.0, 0.25, 0.50, 0.75$ e 1.0 e para $n=2, 3$ e 4 camadas, simulando uma situação de crescimento epitaxial para vários substratos diferentes (diferentes valores de parâmetro de rede), procurando sempre uma configuração (topologia) para a liga, que minimizasse a energia elástica. Com as estruturas obtidas (topologia adequada), nós calculamos a energia de formação, para cada uma das SR nas diferentes situações, considerando somente a energia elástica, em seguida estudamos a formação das camadas de liga na SR (para $x=0.50$) como um processo de sequência de reconstrução na interface (inicialmente abrupta), i.e; uma diluição da interface abrupta. Em seguida nós obtivemos através do empilhamento de planos na direção [001], as estruturas de liga tipo: $Ga_xIn_{1-x}As(P)$, que são obtidas considerando como vínculo aquelas que apresentam um valor

médio de correlação $\langle \Pi_{k,m}(x) \rangle$ que se aproximam do valor médio da correlação de uma liga aleatória e infinita ($\langle \Pi_{k,m}(x) \rangle_R = (2x - 1)^k$) [1]. Desta forma obtemos estruturas tipo "special quasirandom structures" (SQS) para concentrações $x=0.25, 0.50$ e 0.75 . Calculamos então a energia de formação para ligas livres e crescidas epitaxialmente em diferentes substratos ao longo da direção [001]. Comparamos ainda a estabilidade das ligas nas regiões próximas e distantes da interface (liga/material puro) onde a primeira situação é simulada em SR com $n=4$.

[1] S.-H. Wei, L. G. Ferreira, J. E. Bernard e A. Zunger, Phys. Rev. B vol.42, 9622 (1990).

PHOTOLUMINESCENCE AND PHOTO-HALL STUDIES ON PLANAR DOPED $Al_{0.30}Ga_{0.70}As$ SAMPLES GROWN BY MOLECULAR BEAM EPITAXY.

CORRÊA FILHO, J. A.; RIBEIRO, G. M.; OLIVEIRA, A. G. DE

Universidade Federal de Minas Gerais

GERALDO, J. M.

Universidade Federal de Ouro Preto

Photoluminescence and photo-Hall measurements were developed in planar doped $Al_{0.30}Ga_{0.70}As$ samples grown by Molecular Beam Epitaxy. The samples were grown at $570^\circ C$. The silicon was chosen to be n-type doping element. The photoluminescence spectra were obtained at various temperatures in range of 45 to 120 K and laser power intensities. The defects which were correlated to the planar doping with various two-dimensions concentrations have been observed and tentatively attributed to deep level so-called DX center and other complex defects (like donor silicon-III and V element vacancies). The photoluminescence intensities of the complex defects are strongly correlated to the two-dimensions concentration of planar doping. In photo-Hall measurements an infra-red led (1.32 eV) was used. The data were obtained at various temperatures in range of 20 to 150 K and led currents. The photoconductivity phenomena has been shown more pronounced than planar doped GaAs and heterojunctions.

SURFACE PHONON AND E_1 GAP SHIFT OBSERVE IN InAs WIRE CRYSTALS ON POROUS Si

SILVA, S. W. DA; PIZANI, P. S.; ROSSI, J. C.; GALZERANI, J. C.

DF-UFSCAR, 13565-905, SÃO CARLOS, SP, BRASIL
MLAYAH, A.; CARLES, R.

LPS-UPS, 31062, Toulouse, France

LUBYSHEV, D.; BASMAJI, P.

IFQSC-USP, 13560-970, São Carlos, SP, Brasil

A great interest has been recently devoted to study the surface phonons in low dimension semiconductor struc-

tures. In this work, we present experimental evidence of a surface phonon mode and the E_1 gap shift in InAs wire crystals grown by molecular beam epitaxy on porous silicon (PS). The substrates used were (111) oriented, P-type silicon. After electrochemical preparation, the porous silicon was introduced to the MBE machine where InAs epitaxial layer were prepared in two steps according to the method described elsewhere [1]. Raman spectra of InAs/PS samples under non resonant conditions ($E_i = 2.414 eV$) at the temperatures 300K and 90K are performed. These spectra are dominated by two prominent features around 217 and 239 cm^{-1} at room temperature and assigned to TO and LO modes respectively. Their positions and line widths are comparable to those observed in bulk InAs. However, the same spectra show evidence of an additional band located between LO and TO peaks, more clearly observed at low T. Silimar observation has been done by Watt et al [2] on GaAs cylinder arrays and assigned to surface mode, according to the model proposed by Ruppin and Englman [3]. Moreover, the observed blue shift in the resonance curve ($\cong 20 meV$) of InAs/PS system in comparison with the bulk system [2] could be interpreted as an effect of confinement of electronic states as suggested to happen in PS. We acknowledge FAPESP, FINEP, CAPES and CNPq for financial support. 1. P. Basmaji et al Phys. Stat. Sol. a 139, K21 (1993). 2. M. Watt et al. S. Sci. Tech. 5, 285, (1990). 3. R. Ruppin et al Rep. Prog. Phys. 33, 149 (1970).

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UM POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO COM DOPAGEM DELTA

SOUZA, M. A. R.; LEÃO, S. A.; FERREIRA, J. V. B.; DEGANI, M. H.

USP-Instituto de Física e Química de São Carlos
LIMA, W. L. C.

Fundação Universidade do Tocantins

Calculamos a estrutura eletrônica do sistema formado por dois poços quânticos assimétricos ($Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$) com dopagem delta (Si) no centro de cada poço em função de vários parâmetros: temperatura, espessura da barreira de potencial que separa os dois poços, concentração e difusão dos átomos doadores. A equação de Schrödinger foi resolvida numericamente usando-se o método "Split-Operator" dentro da teoria do funcional densidade na aproximação de densidade local. Verificamos que a estrutura eletrônica é pouco influenciada pela temperatura e difusão dos doadores. Por outro lado, nossos resultados mostram que ela depende de forma significativa da concentração dos doadores. Investigamos também como o sistema é influenciado por uma tensão

elétrica aplicada na direção de crescimento. Calculamos os níveis de energia e ocupação das sub-bandas em função da tensão elétrica aplicada. Uma possível aplicação para esse sistema é analisada, onde verificamos que ele apresenta efeitos de mobilidade modulada e transcondutância negativa quando as mobilidades nos dois poços são diferentes. A dinâmica desse sistema também foi considerada. Consideramos ainda o caso em que um campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento. Nossos resultados mostram que a forma da relação de dispersão $\epsilon_n(k_x)$, inicialmente parabólica, é bastante modificada pelo campo magnético, surgindo estados ressonantes para k_x diferente de zero. A massa efetiva eletrônica nessa direção também é modificada, dependendo agora da energia do elétron. Para campo magnético nulo verificamos que a massa efetiva é diferente em cada sub-banda.

CÁLCULO DA INTENSIDADE DE ESPALHAMENTO RAMAN POR FÔNONS ACÚSTICOS EM SUPERREDES

PILLA[†], O.; LEMOS, V.

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

MONTAGNA, M.

"Università degli Studi di Trento" - Itália

Neste trabalho é desenvolvido um cálculo para a intensidade de espalhamento Raman por fônons acústicos longitudinais em superredes. Os fônons são considerados como ondas elásticas, se propagando na direção de crescimento da superrede. É levado em consideração no cálculo, a diferença de impedância acústica entre as camadas a modulação fotoelástica, e o efeito do campo elétrico da radiação incidente. Apenas a geometria de retroespalhamento é considerada. A superrede é idealizada, com camadas planas sem qualquer rugosidade nas interfaces. A propagação de ondas elásticas é descrita em base ao método de matrizes de transferência para solução da equação do movimento nas camadas sucessivas [1]. Aqui é mostrado que a descrição quantitativa de intensidades relativas é possível quando o cálculo leva em conta a estrutura completa da superrede, incluindo a presença de substrato e camada protetora (capping layer). ([1] J. He, B.D-Rouhani, J. Sapriel, Phys. Rev. B, 37, 4086 (1988))

[†] Professor visitante "Università degli Studi di Trento" - Itália

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SISTEMAS BIDIMENSIONAIS MODULADOS NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO

ANDRADE NETO, M. A.; SCHULZ, P. A. B.

Instituto de Física Gleb Wataghin-DFESCM-UNICAMP

Recentes avanços em nano-tecnologia permitem a modulação periódica de sistemas eletrônicos bidimensionais, como o gás de elétrons que se forma numa hetero-

junção de GaAs-AlGaAs. A modulação origina um cristal bidimensional, ou super-rede lateral, cuja superfície de Fermi, agora uma curva, pois trata-se de um sistema 2D; poderia ser verificada experimentalmente em medidas de magneto-transporte. Nesse trabalho calculamos a estrutura eletrônica desses sistemas, simulados por meio de modelo tight-binding. Consideramos uma rede bidimensional com dois tipos de sítios, com os quais geramos barreiras de potencial (a modulação) periodicamente dispostas na rede hospedeira. Efeitos de campo magnético são introduzidos por meio de uma substituição de Peierls, ou seja, o acréscimo de uma fase dependente do campo magnético aos termos de "hopping". Discutimos os limites de modulação fraca, onde o espectro de Hofstadter se manifesta e o limite de modulação forte. Existem dados experimentais para ambos os limites. Nosso interesse maior concentra-se no limite de modulação forte com baixa densidade de portadores, onde os efeitos predominantes sobre o magneto-transporte deixam de ser clássicos para tornarem-se quânticos. A utilização do modelo para o estudo dos limites semi-clássicos desses sistemas é analisada.

Energias de ligação e densidades de estados excitados de doadores rasos em poços quânticos de GaAs-AlGaAs

CARNEIRO, G. N.; WEBER, G.; OLIVEIRA, L. E.

Unicamp

O estudo de impurezas rasas em estruturas semicondutoras tais como poços quânticos e super-redes tem tido um continuado interesse experimental. A comparação bem sucedida entre métodos teóricos, tais como o modelo variacional, e resultados experimentais como de fotoluminescência [N. N. Ledentsov, N. Tsukada and K. Ploog, Appl. Phys. A 54, 261 (1992)] é uma forte motivação para o aprofundamento dos estudos teóricos. Neste trabalho realizamos um cálculo da energia de ligação de uma impureza doadora rasa (hidrogênica) em um poço quântico de barreiras finitas seguindo o modelo variacional proposto por Bastard [Phys. Rev. B 24, 4714 (1981)]. Além do estado fundamental ($1s$) obtivemos os primeiros estados excitados: $2s$, $2p_x$, $2p_z$, $3s$, $3p_x$ e $3p_z$. Tais energias foram calculadas em função da posição da impureza e diversas larguras de poço. Em especial para os estados np_z de impurezas localizadas na interface (que ainda não haviam sido calculados) observamos um comportamento bastante diferenciado quando comparado aos estados np_z localizados no centro do poço.

Também apresentamos densidades de estados de impurezas para estes estados excitados e discutimos sua influência nos espectros de absorção ótica.

NÍVEIS ELETRÔNICOS EM POÇOS QUÂNTICOS TENSIONADOS DE

$In_xGa_{1-x}As/GaAs$

RODRIGUES, S. C. P.; SCOLFARO, L. M. R.
Instituto de Física da USP

Um dos principais objetivos do crescimento epitaxial de estruturas tensionadas é a obtenção de filmes finos com propriedades distintas daquelas observadas nos materiais quando "bulk". Tipicamente, estes filmes são crescidos por MBE e são formados de compostos semicondutores que possuem diferentes parâmetros de rede ("lattice-mismatch"). Tais estruturas oferecem alta flexibilidade em adequar suas propriedades eletrônicas e óticas e têm, por isso, sido utilizadas com sucesso na fabricação de novos dispositivos optoeletrônicos. Devido às variações significativas na estrutura de faixas destes sistemas, em virtude do tensionamento, elas permitem o controle da faixa proibida e transições quânticas associadas através da alteração na composição (tensionamento) e espessura das camadas (confinamento). Neste trabalho apresentamos um estudo sistemático da estrutura eletrônica de poços quânticos tensionados de $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ visando o entendimento do comportamento dos níveis de sub-bandas como função do "band-offset", largura do poço e da magnitude da tensão. Os cálculos consistem na solução da equação de Schroedinger unidimensional para o sistema em questão, levando-se em conta apropriadamente os valores para as massas efetivas de elétrons e buracos. Procuramos também, comparar os resultados teóricos com dados experimentais de fotoluminescência.

A possibilidade de acumulação de cargas na superfície quando da formação de amostras com dopagem planar

FREIRE, S. L. S.; SAMPAIO, J. F.
UFMG

A inserção de impurezas em apenas uma pequena região em torno de um plano cristalino de um cristal semicondutor é denominada dopagem planar ou δ -Doping. Este sistema forma um gás bidimensional de elétrons confinados na direção do crescimento, em um potencial na forma de um "V" modificado por blindagem e tem sido bastante estudado na literatura. A determinação dos níveis eletrônicos desse potencial, que constituem os fundos de sub-bandas do sistema bidimensional, bem como a ocupação destas sub-bandas e a forma do potencial, são feitas através de cálculos auto-consistentes das equações de Poisson e Schroedinger, levando-se em consideração a estatística de Fermi-Dirac na ocupação das sub-bandas. É comum na literatura definir o potencial químico apenas pelo sistema bi-

dimensional, desprezando-se a influência do bulk ou da superfície do cristal. Mostraremos neste trabalho que a consideração de tais influências leva a resultados que podem ser bastante diferentes daqueles encontrados na literatura. Comparações com resultados experimentais serão discutidas com o intuito de se determinar qual sistemática é mais adequada.

ESPALHAMENTO RAMAN RESSONANTE E ELETORREFLETÂNCIA EM HETEROESTRUTURAS DE Ge_5Si_5

SILVA, M. A. A.; RODRIGUES, P. A. M.; CERDEIRA, F.

Instituto de Física "Gleb Wataghin," UNICAMP,
13083-970 Campinas, SP

BEAN, J. C.

AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974

Fizemos medidas de espalhamento Raman ressonante (ERR) na temperatura ambiente e eletorrefletância (ER) a 77K em uma série de amostras de Ge_5Si_5 . As amostras consistem de poços quânticos de cinco monocamadas de Ge separados por barreiras de Si, crescidos comensuradamente em substratos de Si (100) por MBE. Três tipos de estruturas foram estudadas: um poço quântico simples (1QW), um poço quântico duplo separado por cinco monocamadas de Si (2QW), e seis repetições da unidade Ge_5Si_5 (6QW). Os resultados são comparados com similares obtidos de uma superrede com tensão simetrizada Ge_5Si_5 e uma liga $Ge_{0.5}Si_{0.5}$. As principais contribuições para os espectros de ER são interpretadas como transições ópticas do tipo E_1 , com caráter predominante de estados Ge ou Si "bulk," modificados por efeitos de confinamento e "zone folding". Esses últimos efeitos progridem de um, dois e seis poços até uma verdadeira superrede (infinitos poços). A seção de choque Raman dos fônons confinados em cada uma das camadas de Ge ou de Si tem sua ressonância em diferentes frequências do laser incidente. Comparando os picos da seção Raman do ERR para cada tipo de fônon com as transições ópticas da ER, podemos assegurar que essas últimas estruturas estão associadas a transições eletrônicas envolvendo estados que estão principalmente confinados em uma das camadas constituintes. Nossos resultados para 6QW concordam bem com aqueles da verdadeira superrede, quando levamos em conta o diferente padrão de tensão das amostras. Isto indica que o efeito do potencial periódico nos estados eletrônicos ao longo da linha Λ em Ge e Si "bulk" sofre influência de "zone folding" mesmo para superredes muito curtas. Em contraste com o espectro dos fônons ópticos, o do ramo acústico é mais sensível ao número total (n) da unidade $(Ge_5Si_5)_n$.

DIPOLos ELÉTRICOS EM $Al_xGa_{1-x}As$ - ESTÃO RELACIONADOS AOS CENTROS DX ?

SCALVI, L. V. DE A.

Depto. Física, UNESP-Bauru

OLIVEIRA, L. DE; LI, M. S.

DFCM - Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

SIRERA, L. E. P.

Depto. Engenharia Elétrica, UNESP-Bauru

A presença de dipolos em filmes de $Al_xGa_{1-x}As$ dopados com Si foi verificada para amostras tanto de gap direto¹ como indireto, através do experimento conhecido como Corrente de Despolarização Termicamente Estimulada (CDTE). É possível que tais dipolos estejam relacionados com a interação entre DX^- (centro DX^- - átomo de Si deslocado para a posição intersticial e carregado negativamente) e d^+ (doador ocupando a posição normal substitucional e carregado positivamente), desde que as energias de ativação obtidas para relaxação destes dipolos (da ordem de 100 meV) estão em ótima concordância com a energia de ligação do centro DX^- . Neste trabalho nós apresentamos dados experimentais de CDTE para $Al_xGa_{1-x}As$ de gap direto e indireto, os quais revelam a existência de dipolos neste material, e também a simulação numérica para obter a energia de ativação, baseada numa distribuição de tempos de relaxação. Além disso são apresentados cálculos de espalhamento de elétrons por dipolos em $Al_xGa_{1-x}As$ a baixa temperatura para verificar a possibilidade do dipolo encontrado ser realmente $DX^- - d^+$, conforme hipótese levantada anteriormente por O'Reilly². Apoio CNPq.

[1] - L.V.A. Scalvi, L. Oliveira, E. Minami e M.Siu-Li, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 2658 (1993)

[2] - E.P. O'Reilly, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 1409 (1989)

PLASMONS SUPERFICIAIS EM SEMICONDUCTORES ANISOTRÓPICOS COM SUPERFÍCIE PERIÓDICA

COSTA FILHO, R. N. DA; FARIAS, G. DE A.

Universidade federal do Ceará

ALMEIDA, N. S. DE

UFRN

Obtemos a relação de dispersão para plasmons superficiais propagando-se em um semicondutor anisotrópico semi-infinito, cuja superfície possui um perfil periódico. As equações de Maxwell são resolvidas sem efeito de retardamento e usamos o método de Rayleigh nas condições de contorno. Mostramos que a curva de dispersão possui um número infinito de ramos. Isto mostra que a existência de um perfil periódico permite que este sistema tenha infinitas ressonâncias no problema de espalhamento de elétrons por estas superfícies. Soluções numéricas são obtidas para uma superfície periódica descrita por uma função senoidal. Os efeitos da anisotropia são comparados com um semicondutor isotrópico

e a convergência do método é mostrada para diferentes valores da periodicidade e desvio com relação a uma superfície plana.

Γ -X coupling in semiconductor superlattices

RESENDE, X. R.; BRUM, J. A.

*Instituto de Física - DFESCM - UNICAMP, Cx.P. 6165,
13083-970 Campinas (SP)*

We present a study of the coupling among states originated from the Γ and X points of the conduction band induced by the interfaces in a semiconductor superlattice. The coupling is described by a rapidly varying potential which links the effective-mass Hamiltonian in the two host materials. We consider the GaAs-AlAs system and the parameters are chosen in order to have the Γ and the X minibands degenerated. Due to their effective mass differences, the Γ miniband shows a relative large width and the X miniband a narrower one. The effect of the interface is to couple these two minibands. That results in the formation of a mini-gap in this region for the dispersion along the z-direction. The size of this gap is directly related to the strength of the Γ -X coupling. This raises the possibility of an accurate determination of this coupling. Here, we perform a theoretical study of this gap and suggest eventual experiments for its determination

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE MÚLTIPLAS CAMADAS E SUPER-REDES "δ - DOPING" EM Si

SCOLFARO, L. M. R.; BELIAEV, D.; ENDERLEIN, R.;
LEITE, J. R.

Instituto de Física da USP

O avanço das técnicas de crescimento epitaxial tem permitido a obtenção de perfis de dopagem bastante estreitos e abruptos. Atualmente, são produzidos perfis de dopagem no limite de uma única monocamada, chamados "δ - doping", onde os portadores estão confinados no poço de potencial induzido por uma plano de cargas ionizadas. Estruturas tipo δ -doping têm se mostrado promissoras na obtenção de novos dispositivos semicondutores. Neste trabalho, apresentamos o estudo teórico da estrutura eletrônica de camadas delta periódicas (tipo-n) em Si. Os cálculos são autoconsistentes, realizados dentro da aproximação da densidade local, e consideram a estrutura complexa da faixa de condução do Si apropriadamente. Analisamos a dependência com o espaçamento entre os planos delta, d , e a concentração de dopantes, N_D , das minibandas, perfis de potencial, ocupações de minibandas e posição do nível de Fermi. Para $d > 150 \text{ \AA}$ $10^{13} < N_D < 10^{15}$ o sistema se comporta como poços delta-isolados. Dispersão significativa das subbandas de energia mais altas aparecem para $d < 50 \text{ \AA}$. A transição

de um comportamento tipo multi-delta para o regime tipo super-rede é observado para concentrações de dopantes $> 2.0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ e períodos $d < 50 \text{Å}$. Analisamos a transição isolante-metal nestes sistemas e comparamos os resultados também com os obtidos para "δ-doping" em GaAs.

NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS SEMICONDUCTORES NÃO-ABRUPTOS DO TIPO $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

FERREIRA, E. C.; COSTA, J. A. P. DA
Departamento de Física, UFRN, Natal(RN), Brasil
FARIAS, G. A.; FREIRE, V. N.
Departamento de Física, UFC, Fortaleza(CE), Brasil

Expressões para o potencial e a massa efetiva de portadores (elétrons e buracos) de poços quânticos semicondutores $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ não-abruptos são obtidos com a hipótese de uma variação linear da fração molar de alumínio nas interfaces. Os níveis de energia desses poços semicondutores não-abruptos são calculados através da técnica da matriz de transferência e da aproximação de massa efetiva constante nas interfaces. Mostramos que os níveis de energia dos poços semicondutores não-abruptos podem vir a diferir razoavelmente daqueles de poços abruptos. Estas diferenças dependem diretamente da largura das interfaces, e acentuam-se com a assimetria entre as interfaces de um mesmo poço. Com base na largura do poço e de suas interfaces, estabelecemos uma regra para a determinação do nível de sua abrupticidade.

ESTRUTURA ELETRÔNICA DO $\text{GaAs} : \text{O}_{\text{As}}$

CALDAS, M. J.
IFUSP
MARQUES, A. L. F.
DFQ/ICI/EFEI
RODRIGUES, C. W.
LME/POLI/USP

Oxigênio é um dos contaminantes mais comuns em semicondutores. Ele tem sido detectado em silício, germânio, GaP , GaAs , AlGaAs em concentrações de 10^{15} a 10^{20}cm^{-3} . Em silício, trabalhos da década de 60, mostraram que o oxigênio pode ser incorporado na rede cristalina de duas maneiras: (i) estável (localização eletricamente inativa no sítio intersticial), (ii) substitucional (eletricamente ativo criado durante irradiação de partículas rápidas). Seu papel, entretanto, em GaAs ainda não está claro. No final da década de 80 foram observados modos locais vibracionais de oxigênio no GaAs ($714,21$, $714,87$ e 730cm^{-1}). Estes estados vibracionais podem ser fotoconvertidos quando são iluminados por fótons do infravermelho próximo. Devido a esta característica foi proposto que o defeito responsável por estes modos é a impureza de oxigênio, $\text{GaAs} : \text{O}_{\text{As}}$, nos

seus três estados de carga: neutro, O^{1-} e O^{2-} . Estudamos este defeito utilizando o método INDO1 em aglomerados de 71 átomos de GaAs com um átomo de oxigênio substituindo um átomo de arsênio. O modelo de aglomerado proposto usa como saturadores de superfície pseudoátomos dos hospedeiros, e já foi utilizado para defeitos em GaAs e Si .

Trabalho financiado pela CAPES e CNPq

FOTOCONDUCTIVIDADE PERSISTENTE POSITIVA E TRANSIÇÃO TIPO N PRA TIPO P EM GAAS COM DOPAGEM PLANAR DE SI.

SILVA, M. I. N. DA; RUBINGER, R. M.; SOARES, D. A. W.; RIBEIRO, G. M.; OLIVEIRA, A. G. DE
Depto. de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais

Medimos a mobilidade e a concentração de portadores livres em amostras de GaAs com dopagem planar de Si, com concentração nominal de $1,4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, em função da temperatura em condição de escuro e sob iluminação utilizando um LED emitindo no infravermelho. Das curvas em função da temperatura, a dependência da mobilidade com a concentração de portadores pode ser calculada. Em trabalhos anteriores mostramos que esta estrutura apresenta o efeito de fotocondutividade persistente positiva, o que foi associado com separação espacial de cargas. Esta hipótese foi corroborada pela existência de uma faixa de temperatura, em que a amostra apresenta comportamento tipo p. A presença de um gás de buracos de alta mobilidade sugere a coexistência de dois canais, um tipo n e outro tipo p, sugerindo a existência dos efeitos associados a separação espacial de cargas. O estudo sistemático da mobilidade em função da temperatura e da concentração de portadores fornece informações sobre as contribuições dos vários canais de condução, sejam eles espacialmente separados sejam eles inter sub-bandas dentro de um mesmo canal.

ENERGIAS DE LIGAÇÃO ASSOCIADAS AOS ESTADOS EXCITADOS DE DOADORES EM POÇOS QUÂNTICOS DE

$\text{GaAs}-(\text{Ga},\text{Al})\text{As}$

SANTIAGO, R. B.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

OLIVEIRA, L. E.

Unicamp

CASTRO, J. D. E

Universidade Federal Fluminense

São apresentados os cálculos para as energias de ligação associadas ao estado fundamental e ao primeiro estado excitado de impurezas rasas doadoras em poços quânticos de $\text{GaAs}-(\text{Ga},\text{Al})\text{As}$. Fazemos uso do método

variacional dentro da aproximação da massa efetiva. Propomos uma função de onda tentativa que é dada por uma combinação linear de produtos da solução do poço quântico sem o potencial da impureza pelas funções de onda do estado fundamental e do primeiro estado excitado do átomo de hidrogênio. Além de ser considerado a não ortogonalidade das funções de onda, os parâmetros variacionais são obtidos através de uma minimização simultânea dos mesmos. Apresentamos nossos resultados para diferentes larguras do poço e posições da impureza.

ESTUDO DE HETEROESTRUTURAS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE PARA SIMULAÇÕES NUMÉRICAS: MINI-BANDAS, STARK LEADER E OSCILAÇÕES DE BLOCH EM SUPER-REDES

BOŠQUETTI, D.; MANZOLI, J. E.; HIPÓLITO, O.
DFCM - Instituto de Física e Química de São Carlos - USP

Efetuamos um estudo analítico do método "k.p", usando posteriormente a aproximação proposta por E. O. Kane para determinar as expressões da massa efetiva dos elétrons na banda de condução e dos buracos na banda de valência, as quais serão utilizadas numa aproximação de bandas não perturbadas para cálculos numéricos. Utilizando a técnica numérica do Split-Operator, a qual efetua as evoluções temporais de pacotes de ondas e valores esperados, al'ém de calculamos, agora em tempo imaginário, os auto-estados, auto-energias e valores esperados de portadores em sistemas simples de baixa dimensionalidade. Simulamos numericamente um sistema que envolve um número grande, mas finito, de poços quânticos simétricos e acoplados, onde aplicamos campos elétricos e magnéticos estáticos, uniformes e independentes entre si, calculando suas minibandas de valência e de condução, e mostrando assim a escada stark de níveis de energia e a oscilação de bloch.

Estabilidade em super-redes III-V

MIWA, R. H.; SILVA, R. C. DA; FERRAZ, A. C.
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Utilizando métodos de primeiros princípios estudamos a estabilidade quanto a segregação de fases, entalpia de formação (ΔH), para super-redes $(GaAs)_3(InAs)_3$ e $(GaP)_3(InP)_3$ crescidas ao longo da direção [001]. Calculamos a entalpia de formação em duas situações distintas: (a) a energia total em relação aos seus constituintes (materiais puros: GaAs, InAs, GaP e InP) em equilíbrio, super-rede livre; (b) num crescimento epitaxial onde a entalpia de formação da super-rede é calculada em relação aos seus constituintes numa fase pseudomórfica, isto é, os constituintes em separado assumem o parâmetro de rede do substrato no plano de

crescimento. Em seguida estudamos a estabilidade na região de interface, para as mesmas estruturas com crescimento livre e epitaxial, quanto a formação de uma liga local através da interdifusão de camadas (planos atômicos), com a inversão de um plano ($n=1$) e em seguida a inversão de dois planos ($n=2$). Estudamos ainda, as etapas intermediárias de uma inversão de uma camada na interface ($n=1$): interdifusão atômica, utilizando o modelo Valence Force Field (VFF). Nesse cálculo tomamos reconstruções 2×2 na região de interface e inferimos o valor da contribuição química na estabilidade como um intermediário entre a energia química para a formação de uma interface abrupta e a necessária para a formação de uma interface com inversão de uma camada ($n=1$).

Estudo do confinamento de elétrons em δ -doped de Si em GaAs por um cálculo de primeiros princípios

SCHMIDT, T. M.; FAZZIO, A.
IFUSP - SP

O confinamento de impurezas doadoras num plano atômico normal a direção de crescimento de semicondutores III-V, chamado δ -doping, gera um poço de potencial na forma de um V com um gás de elétrons quassibidimensional. Neste trabalho fazemos um cálculo de primeiros princípios com pseudopotenciais *ab initio* dentro do formalismo do funcional da densidade numa base de ondas planas. Através da análise da densidade de carga no plano formado pelos átomos de Si num cristal de GaAs, verificamos que a nuvem eletrônica já fica bem confinada no plano para um período de dopagem de apenas 4 parâmetros de rede (a análise é feita para períodos de até 12 parâmetros de rede). Observando a dispersão das bandas de energias encontramos que em certas direções da zona de Brillouin, a presença da dopagem δ apresenta um caráter metálico.

ANÁLISE SISTEMÁTICA DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE ESTRUTURAS DELTA-DOPADAS EM SEMICONDUTORES

LINO, A. T.; TAKAHASHI, E. K.
Universidade Federal de Uberlândia

SCOLFARO, L. M. R.; BELIAEV, D.; LEITE, J. R.
Universidade de São Paulo

Heteroestruturas semicondutoras envolvendo camadas delta-dopadas têm sido assunto de investigações intensas, não só do ponto de vista da ciência básica mas também aplicada devido às suas várias aplicações tecnológicas principalmente na produção de dispositivos de efeito de campo (δ -FETs). Neste trabalho, apresentamos um estudo teórico comparativo da estrutura eletrônica de múltiplas camadas delta-dopadas, tipicamente, periodicamente em GaAs e Si. Os cálculos são re-

alizados utilizando a aproximação da massa efetiva e baseiam-se na solução autoconsistente da equação de Schroedinger e de Poisson, dentro da aproximação do funcional densidade. Efeitos de muitos elétrons, tais como o exchange-correlação são incluídos através da aproximação analítica sugerida por Hedin e Lundqvist. Analisamos o comportamento dos níveis eletrônicos, perfis de potenciais, ocupações de minibandas e posição do nível de Fermi como função da concentração de doadores ionizados e do espaçamento entre os planos. Os resultados são discutidos em termos de efeitos de confinamento em ambos semicondutores, massas efetivas, estruturas de minibandas, níveis de dopagem, comportamento do nível de Fermi, etc.

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE POÇOS QUÂNTICOS $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ DELTA-DOPADOS (δ -SI) SOB EFEITO DE CAMPOS MAGNÉTICOS

TAKAHASHI, E. K.; LINO, A. T.; SCHMIDT, T. M.
Univ. Federal de Uberlândia
SCOLFARO, L. M. R.; LEITE, J. R.
Universidade de São Paulo

O comportamento de portadores bidimensionais (2D) em heteroestruturas semicondutoras tipo heterojunções e poços quânticos sob efeitos de campos magnéticos paralelos às interfaces tem sido assunto de investigações intensas nos últimos anos. Diferentemente do que ocorre no caso do campo perpendicular, onde o movimento dos portadores fica quantizado em níveis de Landau e, portanto, os portadores ocupam estados discretos devido à quantização na direção do campo pelo próprio potencial das interfaces, quando os portadores 2D estão sujeitos a campos paralelos, a situação é mais complexa. Enquanto na direção paralela a B os portadores mantêm seu movimento livre, no plano perpendicular eles estão sujeitos a uma combinação de força magnética, eletrostática e de confinamento. Neste trabalho investigamos o comportamento de portadores 2D, oriundos de uma dopagem delta e confinados em um poço quântico, sob efeito de campo B paralelo. Apresentamos cálculos autoconsistentes da estrutura eletrônica de poços quânticos $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ delta-dopados com silício (dopagem- δ no centro do poço). Os cálculos baseiam-se na solução conjunta das equações de Schroedinger e de Poisson e incluem efeitos de exchange e correlação dentro da aproximação do funcional densidade. Os efeitos do campo magnético sobre a estrutura de níveis de sub-bandas, relações de dispersão e ocupações são analisados.

Espectro de uma impureza doadora localizada em um poço quântico, com campo magnético aplicado, segundo o modelo Γ -X.

EMMEL, P. D.
UFSCar
LIMA, I. C. DA C.
INPE e USF

No tratamento usual de níveis de energias eletrônicos em estruturas heterogêneas, os estados confinados são obtidos a partir de estados de semicondutores tridimensionais com uma determinada simetria. No caso de poços quânticos do tipo $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ com $x \leq 0,4$ os estados de menores energias da banda de condução são obtidos dos estados tridimensionais com simetria do tipo Γ . Com esta suposição os outros mínimos relativos da banda de condução de simetrias diferentes dos materiais componentes, por exemplo os mínimos L e X , gerariam conjuntos separados de estados não interagentes, os estados confinados L e X . Entretanto, devido à quebra da periodicidade na direção de crescimento, resultando na não conservação de k nesta direção, é possível a hibridização dos estados Γ e X . Isto é muito importante para hetero-estruturas para as quais os materiais componentes tenham mínimos da banda de condução de diferentes simetrias, como é o caso de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (com $x \geq 0,4$) e Si/Ge . Usamos este modelo para calcular os estados ligados de impurezas doadoras em poços quânticos.

CALCULO DA DENSIDADE DE ESTADO DE UMA MOLÉCULA DE IMPUREZA VIA ALTERNANT MOLECULA ORBITAL (AMO)

MOTA, F. DE B.; CAMPOS, H. S.
UFBA
SILVA, A. F. DA
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

Através do método das pequenas perturbações independentes do tempo, obtemos o tensor polarizabilidade da molécula de impureza doadora em um campo elétrico uniforme. Para o cálculo das energias e ordem de ordem zero foi utilizado o tratamento "Alternant Molecule Orbital" (AMO) e então, obtidas as componentes paralela e perpendicular do r . tensor. Deste modo, determinamos as energias fundamentais da molécula neutra e ionizada obtendo assim a energia de ionização. A partir desta energia calculamos a densidade de estado, considerando um valor médio para a função de Green, devido a pares de impurezas imersos no campo elétrico. Os resultados serão comparados com aqueles obtidos para sistemas na ausência de campo.

IDENTIFICAÇÃO DO CAMINHO DE MIGRAÇÃO DO CARBONO INTERSTICIAL EM SILÍCIO

PINO JÚNIOR, A. D.

*Instituto Tecnológico da Aeronáutica - São José dos
Campos-SP*

CAPAZ, R. B.; JOANNOPOULOS, J. D.

*Instituto de Tecnologia de Massachusetts - Cambrige -
Massachusetts*

Realizamos cálculos de primeiros princípios para as propriedades do estado fundamental e possíveis caminhos de migração do carbono intersticial em silício. O estado fundamental apresenta o átomo de carbono e silício realizando apenas três ligações covalentes. A geometria desse estado sugere que a ligação do carbono não apresenta um caráter sp^2 . A investigação dos possíveis caminhos de migração revela que somente três deles correspondem a "saltos" que rompem apenas uma ligação. Dentre estes identificamos o de menor energia que envolve uma simetria do tipo C_2 . Calculamos uma barreira de 0,63 eV para este percurso. Este resultado tem ótimo acordo com os experimentos disponíveis.

Theory of hole confinement in delta-doping structures

SIPAHI, G. M.; ENDERLEIN, R.; SCOLFARO, L. M.
R.; LEITE, J. R.

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

The present work is understood as a contribution to the better understanding of the properties of confined holes in p -type δ -doping structures based mainly on III-V-compound semiconductors. Such structures are now subject to research activities in various laboratories including our own. Among the forces which drives this studies, the presence of a confined hole gas in advanced semiconductor devices like heterostructure bipolar transistors is of particular importance, since a better understanding of hole confinement is necessary for the further improvement of these devices. From the theoretical point of view, the treatment of holes in δ -doping wells is more difficult than that of the electrons. The main reason for this is the multicomponent character of the hole gas (heavy and light holes), and the more complicated energy-momentum dispersion law (non-parabolic and anisotropic). Besides of this, correlation and exchange effects of the particle - particle interaction which plays only a minor role for electrons seems to be important for holes. In this paper a new method for calculating the energetic structure of such systems will be developed which avoids the errors of previous procedures [1-2]. It is based on plane wave expansion and uses the 4×4 Kohn-Luttinger Hamiltonian as the kinetic energy operator of the holes. The hole-hole interaction is taken into account self-consistently. Plane waves form the natural basis set for the multicomponent-effective mass theory since here

the kinetic energy operator is primarily given in this representation. By means of the new method miniband structures, wave functions, Fermi level positions, charge density and potential distributions are calculated. [1] D. Richards, J. Wagner, H. Schneider, G. Hensdorfer and M. Mayer, Phys. Rev. B47,9629 (1993) [2] F. A. Reboredo and C. R. Prietto, Phys. Rev. B47, 4655 (1993)

Propriedades Dinâmicas de Semicondutores: Simulação Numérica do Calor Específico do GaAs, SiC e BP

DRUMMOND, E.; ALVES, H. W. L.

*Depto. de Ciências Naturais, FUNREI - Fundação de
Ensino Superior de São João del Rei, São João del Rei -
MG*

Apresentamos, neste trabalho, um algoritmo para a determinação numérica dos calores específicos a volume constante (C_v) de materiais semicondutores, baseado na resolução da seguinte integral ^a,

$$C_v = \int_0^{\infty} \frac{\exp(\hbar\omega/kT)}{[\exp(\hbar\omega/kT) - 1]^2} \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 k D(\omega) d\omega,$$

onde $\omega = \omega(\vec{k})$ é a relação de dispersão dos modos normais de vibração do sólido e $D(\omega)$ é a densidade destes modos no intervalo de frequências entre ω e $\omega + d\omega$. A relação de dispersão dos fônons foi determinada construindo parâmetros para o "Valence Overlap Shell Model" de resultados *ab initio* de alguns dos modos vibracionais nos pontos de alta simetria da zona de Brillouin, calculados através do "Frozen Phonon Method" dentro da Teoria do Funcional Densidade^b. A Densidade de Estados, por sua vez, foi obtida através da rotina de Gilat-Raubenheimer^c. Como exemplos de simulação, calculamos a dependência de C_v com a temperatura para o GaAs, SiC e BP, procurando comparar, sempre que possível, com os dados experimentais existentes na literatura.

^aS. S. Mitra and N. E. Massa, Handbook on Semiconductors, edited by T. S. Moss and W. Paul, vol. 1, p. 81 (North-Holland, Holland, 1982)

^bH. W. Leite Alves and K. Kunc, J. Phys.: Condens. Matter 4, 6603 (1992)

^cG. Gilat, J. Comput. Phys. 10, 432 (1972)

ESTADOS LIGADOS DE ELÉTRONS E BURACOS EM UMA DESCLINAÇÃO

FURTADO, C.; MORAES, F.

Departamento de Física UFPE

Nos últimos anos, várias áreas da Física tem procurado explorar os efeitos da topologia nas propriedades físicas de certos sistemas reais. A presença de defeitos topológicos tem se manifestado na física moderna: na Gravitação (monopolos, cordas, barreiras de domínio)

e em matéria condensada (vórtices, desclinações, deslocamentos, solitons e barreiras de domínios). A presença de um defeito topológico em um meio elástico contínuo muda a topologia e a geometria do espaço, de uma região conexa para uma multiconexa. Por este motivo as características físicas de uma partícula movendo-se em um meio com defeito são modificadas em comparação a uma partícula em um meio livre de defeitos. Neste trabalho estudamos estados ligados de elétrons e buracos a desclinações no contexto da teoria de defeitos de Katanaev e Volovich [1], em um semicondutor. Mostramos que desclinações positivas repelem elétrons e buracos e desclinações negativas formam estados ligados com ambos. Calculamos as autofunções e autoenergias para estes estados ligados. Os efeitos do núcleo da desclinação na dinâmica das quasipartículas será apresentado separadamente.

[1]M. O. Katanaev e I. V. Volovich, Ann. Phys.(N.Y.) 216 1 (1992)

LOCALIZAÇÃO DE QUASIPARTÍCULAS NO NÚCLEO DE DESCLINAÇÕES

MORAES, F.; FURTADO, C.
Departamento de Física- UFPE

É bem conhecido que defeitos topológicos em semicondutores têm um efeito notável em suas propriedades eletrônicas. A região externa ao defeito é deformada introduzindo modificações na dinâmica de elétrons e buracos [1]. O núcleo do defeito, entretanto, pode induzir estados localizados. Neste trabalho estudamos a localização de elétrons e buracos no núcleo de desclinações no contexto da teoria de defeitos de Katanaev e Volovich [2]. Neste contexto, o potencial de deformação, a interação efetiva entre elétrons e fonons, aparece como uma métrica não-Euclidiana e a topologia modificada contribui com um termo de auto-interação. No caso de uma desclinação linear a curvatura é singular sobre o defeito. A inclusão de um núcleo finito para a desclinação remove a singularidade e proporciona um potencial efetivo que dá origem a estados localizados.

[1] Claudio Furtado e Fernando Moraes, submetido a publicação e estes anais.

[2] M. O. Katanaev e I. V. Volovich, Ann. Phys.(N.Y.) 216 1 (1992).

POSITIVE PERSISTENT PHOTOCONDUCTIVITY AND n- TO p-TYPE TRANSITION IN SILICON PLANAR-DOPED GaAs

OLIVEIRA, A. G. DE; RIBEIRO, G. M.; F, J. A. C.
UFMG
SOARES, D. A. W.
Esc. Fed. Engenharia de Itajubá

Photo-Hall free carrier concentrations and mobilities were measured on an MBE grown silicon planar-doped GaAs, with a silicon nominal concentration of $1.4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, as a function of temperature. We observed both negative and positive persistent photoconductivity on silicon planar-doped GaAs structures. The present work is related to the positive persistent photoconductivity (PPPC) effect observed in silicon planar-doped GaAs. We found some evidence that the observed PPC is related to spatial charge with a fixed separation. The persistence comes about due to the presence of holes trapped in the space-charge layer, just beneath the sample surface, and then the free electron density recovering must be tunneling-assisted. In the temperature range between 71K and 104K, the Hall free carrier concentration presents p-type characteristics, and at the temperature of 71K the conductivity increases abruptly by a factor of about 40. These effects were associated with the presence of a high mobility quasi-two-dimensional hole gas in the surface space-charge layer.

Hole Subband States of GaAs/AlGaAs Quantum Wells Within the 6x6 Luttinger Model

VALADARES, E. DE C.

Depto. Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

EDWARDS, G.

Department of Electrical and Computer Engineering, Arizona State University, Tempe, Arizona, USA

SHEARD, F.

Department of Physics, University of Nottingham, Nottingham, UK

We present an exact solution for the hole subband dispersion of a [001] symmetric GaAs/AlGaAs quantum well within the 6x6 Luttinger model which extends previous work by L.C. Andreani, A. Pasquarello and F. Bassani, Phys. Rev. B, vol. 36 (1987) 5887, for the 4x4 case. We employ symmetry arguments, to decouple the Kramers doubly degenerate subband states and build well-defined parity states of the quantum well reflection operator which include the spin split off band. Numerical results are presented for the hole subband states and in-plane dispersion curves of a 66Å AlAs-GaAs-AlAs quantum well, which show anticrossing behaviour. The nature of anticrossings between 1st/2nd and 8th/9th subbands is investigated by studying the bulk state decomposition of the envelope functions. In the vicinity of the 1st/2nd subband anticrossing, there is a negligible bulk GaAs spin split off band content. In contrast, in the region of the anticrossing for the higher 8th and 9th subband states, there is consid

Excitons e Propriedades Ópticas (SEM, OTI) - 10/06/94

DISPERSÃO DO CENTRO DE MASSA EXCITÔNICO EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS

TRIQUES, A. L. C.; BRUM, J. A.

Instituto de Física Gleb Wataghin-DFESCM-UNICAMP

Apresentamos, neste trabalho, os resultados do cálculo da relação de dispersão para o movimento do centro de massa excitônico no plano de um poço quântico. O interesse na determinação da relação de dispersão advém dos problemas onde se estuda a dinâmica da formação excitônica e sua relaxação para estados com diferentes vetores de onda, K_{CM} , do movimento do centro de massa, a interação com fótons (polariton) e a relaxação de spin, entre outros. Com o crescente desenvolvimento de técnicas espectroscópicas resolvidas no tempo tem sido possível o estudo desses diversos problemas, e o conhecimento preciso da dispersão do centro de massa do exciton é essencial na interpretação dos resultados experimentais. O sistema utilizado em nossos cálculos foi um poço quântico de $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ crescendo na direção [001]. São incluídos nos cálculos os acoplamentos entre as bandas de buracos leve e pesado. Os resultados obtidos mostram que o efeito "camel-back", observado na dispersão de buracos, produzido pelo acoplamento entre as bandas de buraco está presente também nas curvas de dispersão excitônica. Esse efeito aparece para o exciton, porém, para poços com larguras maiores em relação ao que é observado para as bandas de buraco. Além disso, o perfil tipo "camel-back" das curvas de dispersão excitônica é visivelmente atenuado em comparação com o efeito nas bandas de valência; tal efeito é devido à influência do perfil parabólico da banda de condução nas curvas de dispersão excitônica. Um estudo da massa média do exciton fundamental foi realizado e mostra que estas podem variar significativamente em função da largura do poço e das energias envolvidas no processo. O conhecimento da dispersão excitônica é, portanto, fundamental para a compreensão da dinâmica excitônica.

EXCITONS IN QUANTUM WELLS WITH THICKNESS MODULATION

MARQUEZINI, M. V.; BRASIL, M. J. S. P.; IIKAWA,
M. A. C. F.; BRUM, J. A.

UNICAMP

BERNUSSI, A. A.

CPqD - Telebras

HAMM, R. A.; CHU, S. N. G.; HARRIOT, L. R.;
TEMKIN, H.

AT&T Bell Laboratories

In this work, we report photoluminescence and magnetoluminescence investigations of single modulated InGaAsP/InP QW structures. In a recent work [1], it was shown that the roughening process of (100)InP surfaces can generate periodic sawtooth-like features, elongated in the [011] direction. The growth of thin lattice-matched InGaAsP layers, grown by Metalorganic Molecular Beam Epitaxy, on top of these prepared surfaces gives rise to quantum wells with thickness modulation. TEM measurements show that the InGaAsP layer is approximately 1.5 times thicker at the highest tilted side of the sawtooth shape, as compared to the less tilted side.

Low temperature photoluminescence measurements exhibit two emission lines, attributed to the two distinct regions with different thickness of the modulated well. Temperature evolution of the photoluminescence spectra gives qualitative information about the effect of exciton localization at the interfaces.

Magnetoluminescence experiments were carried out with magnetic fields applied in various directions, with respect to the elongated features. Different shifts for the two emission lines for fields perpendicular to the QW planes is an evidence of lateral confinement on these structures.

1 M.A.Cotta, R.A. Hamm, T.W.Staley, S.N.Chu, L.R.Harriot, M.B.Panish and H.Temkin, Phys. Rev. Lett. **70**, 4106 (1993).

TRANSPORTE DE EXCITONS EM SUPER REDES DO TIPO II

ANTONELLI, A.

UNICAMP

GILLILAND, G. D.; BAJAJ, K. K.

Emory University - Atlanta

WOLFORD, D. J.; BRADLEY, J. A.

IBM - Yorktown Heights

KLEM, J.

Sandia National Laboratories - Albuquerque

O transporte de *heavy-hole* excitons numa super rede GaAs/AlAs do tipo-II foi medido diretamente através de técnicas de medida da fotoluminescência com resolução espacial e temporal. Foi determinado que os excitons são bastante localizados a baixas temperaturas e têm suas mobilidades aumentadas em 3 ordens de magnitude com o aumento da temperatura. Nossos resultados são a primeira confirmação da localização do exciton em super redes do tipo-II e sua ativação térmica para estados de alta mobilidade. Foi desenvolvido um modelo quantitativo para explicar os nossos resultados de transporte e da cinética da fotoluminescência. Nosso modelo permite a determinação da densidade de defeitos não radiativos presentes na interface.

Espectro de ATR devido à Polaritons de Excitons em Super-Redes Semicondutoras com Dispersão Espacial

FULCO, P.; ALBUQUERQUE, E. L.
UFRN

Apresentamos o espectro de polaritons superficiais em uma super-rede semicondutora, formada por camadas alternadas de $GaAs$ e $Ga_{1-x}Al_xAs$ com espessura de função dielétrica diferentes, levando-se em consideração efeitos devidos à dispersão espacial dos modos ópticos (contribuição excitônica) em um dos seus materiais constituintes. A super-rede é descrita na aproximação do meio efetivo, apropriada para grandes comprimentos de onda da excitação. A equação de dispersão dos polaritons é determinada considerando-se efeitos retardados da onda eletromagnética, e a condição de contorno adicional dos excitons (ABC) em sua forma mais geral, isto é, $P(z) + \alpha dP(z)/dz = 0$, onde $P(z)$ é o vetor de polarização excitônica no cristal. Usando a técnica experimental de ATR ("Attenuated Total Reflection"), estudamos também a existência dos modos de superfície dos polaritons de excitons que se propagam na super-rede de tamanho finito [1].

[1] E.L. Albuquerque and P. Fulco, Phys. Stat. Solidi (b), in press (1994).

Suporte Financeiro: CNPq.

EFEITO DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON NOS NÍVEIS DE LANDAU EM InP.

IIKAWA, F.
UNICAMP

RUF, T.; CARDONA, M.
Instituto Max-Planck - Stuttgart

A interação entre o elétron e o fônon óptico longitudinal em semicondutores polares pode ter uma forte influência nas energias dos níveis de Landau na presença de um alto campo magnético. Apesar de InP ser um material pouco polar comparado com os compostos II-VI, essa influência ainda pode ser observada em espectros ópticos. Fizemos uma investigação detalhada sobre esse efeito utilizando o espalhamento Raman ressonante na presença de um campo magnético. Observamos mudanças consideráveis nas intensidades de Raman na região de um fônon óptico longitudinal acima do gap. Além disso, observamos estruturas adicionais nos gráficos da intensidade de Raman em função do campo magnético que não podem ser explicadas através do modelo de polaron usando a perturbação de segunda ordem. Para interpretar estes resultados foi necessário desenvolver um cálculo que leva em consideração mais do que dois níveis de Landau. Esse cálculo concorda qualitativamente com os nossos resultados experimentais.

Processos de captura de portadores em super-redes e poços quânticos devido a emissão de fônons confinados

WEBER, G.; PAULA, A. M. DE
Unicamp

Captura de portadores em poços quânticos e super-redes tem sido objeto de intenso interesse experimental recentemente devido a sua importância para dispositivos semicondutores, com destaque para os lasers de poços quânticos. Neste trabalho analisamos os vários processos que influenciam os resultados experimentais, em especial os obtidos por técnicas óticas, e damos ênfase ao processo que convençionamos chamar de *pseudocaptura* [G. Weber and A. M. de Paula, Appl. Phys. Lett. 63, 3026 (1993)]. Avaliando a influência do processo de pseudocaptura nas medidas óticas conseguimos interpretar os resultados experimentais com bastante sucesso e mostramos a necessidade de conhecer em detalhe as condições de excitação dos portadores fotoinjectados.

Para calcular as taxas de captura dos portadores devido a fônons confinados utilizamos o modelo de continuidade dielétrica (*slab modes*) devidamente corrigido [G. Weber, Phys. Rev. B 46, 16171 (1992); K. J. Nash, 46, 7723 (1992)]. Os processos de captura são considerados como transições intra- e intersub-banda. Distinguimos entre dois processos diferentes: transições de estados não-confinados para estados confinados (captura) e transições intra- e intersub-banda de estados confinados mas com grande energia cinética (pseudocaptura). Mostramos que os processos de pseudocaptura — que são muito mais rápidos que os de captura nos nossos cálculos — influenciam fortemente os tempos de captura efetivamente medidos. Naturalmente uma avaliação completa dos dados experimentais requer um detalhamento cuidadoso das condições de excitação de portadores. Porém, mostramos que em alguns casos uma fração pequena (2-5%) de portadores excitados para estados confinados já é suficiente para provocar uma redução de ordens de grandeza nos tempos efetivos de captura.

Constante dielétrica de um poço quântico dopado com campo magnético aplicado

SILVA, A. F. DA; LIMA, I. C. DA C.
INPE
EMMEL, P. D.
UFSCar

As propriedades óticas de um sistema quase bi-dimensional são muito importantes do ponto de vista de suas aplicações em equipamentos opto-eletrônicos. Neste trabalho nós investigamos os efeitos do campo magnético e concentração de impurezas na constante dielétrica de um poço quântico de $GaAlAs-GaAs$ devido a transições intra-impurezas. A parte imaginária

da função dielétrica, que está associada com a condutividade ótica, exibe um pico a baixas energias (infravermelho distante). Resultados para as energias das transições $1s - 2p_+$ e $1s - 2p_-$ estão em bom acordo com valores teóricos e experimentais existentes na literatura⁽¹⁻³⁾. A compensação é levada em conta através da simulação Monte Carlo das posições das impurezas. A constante dielétrica calculada, em função da concentração de impurezas para um campo magnético e compensação, da origem a um aumento observado em medidas e cálculos teóricos em materiais do tipo $n^{(4)}$.

- 1- N. C. Jarosik, B. D. McCombe, B. V. Shanabrook, J. Comas, J. Ralston, and G. Wicks, Phys. Rev. Lett. **54**, 1283 (1985)
- 2- R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **31**, 913 (1985)
- 3- P. D. Emmel and I. C. da Cunha Lima, Solid St. Comm. **89**, 725 (1994)
- 4- S. Canuto and A. Ferreira da Silva, Phys. Rev. B **48**, 18261 (1993)

ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SISTEMAS MESOSCÓPICOS NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICO E AC INTENSOS

SCHULZ, P. A. B.

Instituto de Física Gleb Wataghin-DFESCM-UNICAMP

HAWRYLAK, P.

Institut for Microstructural Sciences NRC-Ottawa, Canadá

Avanços recentes em física atômica e da matéria condensada demonstram dramáticos efeitos de campos intensos com frequência na faixa de THz sobre propriedades eletrônicas de átomos e materiais semicondutores artificialmente estruturados. É natural supor que a combinação de um campo AC e um campo magnético estático intensos com interações elétron-elétron fortes possa levar a novos e interessantes fenômenos. Essas três condições, isto é, a disponibilidade de campos AC intensos, altos campos magnéticos e interações eletrônicas fortes são facilmente satisfeitas em nanoestruturas de semicondutores. O objetivo desse trabalho é apresentar um tratamento teórico rigoroso para entender o comportamento de sistemas mesoscópicos fortemente interagentes em campos AC intensos na presença de um campo magnético. Os principais resultados são: a) a extensão do teorema de Kohn para campos com intensidade e dependência temporal arbitrárias. b) demonstração de quebra de simetria e transições de fase associadas com essa quebra em quantum dots "vestidos" (dressed) e de como esses processos são controlados pela polarização da radiação.

Fios, Pontos Quânticos e Dispositivos (SEM) - 10/06/94

EFEITOS DE CAMPO ELÉTRICO EM FIOS QUÂNTICOS CORRUGADOS.

FAGOTTO, E. A. DE M.; SCHULZ, P. A.; BRUM, J. A.
UNICAMP

Investigamos as propriedades eletrônicas em fios quânticos corrugados mediante o cálculo da probabilidade de transmissão, em condições de campo elétrico externo aplicado de forma tanto longitudinal como transversa à direção de transmissão. No primeiro caso, acompanhamos pela imposição de crescentes intensidades de campo elétrico, a progressiva localização e deslocamento da estrutura de transmissão eletrônica (Efeito Stark-Wannier) e discutimos, auxiliados pelo cálculo da densidade espectral, a diferente evolução entre os gaps de superrede e os originados da interferência destrutiva entre estados 0-D e 1-D. No segundo caso, analisamos a interferência entre dois canais de transmissão, devido à diferença de caminho imposta pela aplicação de um campo elétrico transversal (Efeito Aharonov-Bohm Elétrico).

Espalhamento Raman em pontos quânticos de CdTe em vidros dopados

PAULA, A. M. DE; OLIVEIRA, C. R. M. DE;
MARQUEZINI, M. V.; MEDEIROS NETO, J. A.;
BARBOSA, L. C.; CESAR, C. L.

Unicamp

Efeitos de confinamento quântico em microcristais de semicondutores em vidros dopados tem sido estudados através de várias técnicas óticas. Medidas de absorção, fotoluminescência e fotoluminescência de excitação mostram claramente esses efeitos nas propriedades eletrônicas desses materiais. Entretanto medidas de espalhamento Raman nesses vidros apresentam resultados controversos à respeito dos efeitos de confinamento quântico nos fônons. Modelos de confinamento de fônons descrevem um deslocamento para o vermelho das frequências de fônon em relação ao fônon de bulk, e um alargamento assimétrico da linha para baixas energias. Resultados obtidos por Scamarcio et al [Phys. Rev. B **45**, 13792 (1992)] em filtros comerciais Schott (vidros dopados com $CdSe_xS_{1-x}$) apresentam um deslocamento da frequência do fonons para o azul, atribuído a efeitos de compressão devido a tensão superficial nos microcristais enquanto que resultados obtidos por Bersani e Lottici [Phys. Stat. Sol. (b) **174**, 575

(1992)] mostram pequenos deslocamento para o vermelho. Porém a análise desses dados é complicada devido a incertezas na composição do semicondutor (x).

Nós apresentamos medidas de espalhamento Raman em vidros dopados com CdTe, preparados em nosso laboratório, que apresentam claramente efeitos de confinamento nos fônons. Medimos um deslocamento de $\approx 8 \text{ cm}^{-1}$ para o vermelho com excitação em comprimento de onda de 514.5 nm. Variando o comprimento de onda de excitação obtemos ressonância com os pontos quânticos de diferentes tamanhos nas várias amostras estudadas, podendo assim estudar a distribuição de tamanhos.

LOCAL FIELD EFFECTS AND LIGHT PROPAGATION IN QUANTUM DOTS STRUCTURES

SURDUTOVICH, G. I.; GHINER, A. V.; GUSEV, G. M.; NASTAUSHEV, Y. V.

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

Among the different semiconductor heterostructures quantum-confined periodical structures with rather high density of quantum dots when distances between them are comparable with other sizes are the most interesting ones. Under interaction with the incident electromagnetic radiation quantum dots behave as the elementary radiators. The collective effects in radiation of such a system may be considered in a classical approach of the molecular optics as a problem of local field factors in a condensed medium. In this work we applied method of integral equations (MIE) [1] of the molecular optics generalized for 2D systems [2] for finding of the dielectric permittivity tensor of the different quantum dots structures. MIE starts from the discrete model of a medium and connects the acting on a given radiator field with the incident field and the field from all the rest radiators. With the help of a general idea of the work [3] we calculate the explicit formulæ for the refractive index n for random (gas, liquid)

$$n^2 - 1 = (n_0^2 - 1) \left\{ 1 + \frac{n_0^2 - 1}{4} (k\bar{b})^2 \right. \\ \left. [(\ln k\bar{b} - c)(1 + \delta) + n_0^2 \frac{\delta - 1}{4}] \right\}, \quad (1)$$

and regular (square lattice) displacements of the quantum dots

$$n^2 - 1 = (n_0^2 - 1) \left\{ 1 + \frac{n_0^2 - 1}{4} (kb)^2 [(\ln kb - c_1)(1 + \delta) \right. \\ \left. + n_0^2 (4c_2(2\sin 2\varphi - 1) - 1/4)(\delta - 1)] \right\} \quad (2)$$

where b is the minimal distance between radiators, $\bar{b} = b$ for gas and $\bar{b} = b/2$ for liquid, k is wave number of light. The constant c equals 0.62 for gas and 0.79 for liquid.

Parameter δ equal 1 or 0 depending on orientation of the electric field vector. The value n_0 is determined by the two-dimensional analog of the Lorentz-Lorenz formula. We are in the process of the investigation of the optical characteristics of the periodical quantum dots structure.

1. M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press, Oxford, 1964.

2. A.V. Ghiner and G.I. Surdutovich, submitted to Phys. Rev. A.

3. A.V. Ghiner and G.I. Surdutovich, Phys. Rev. A, **49**, 1313, (1994).

RESSONÂNCIA CICLOTRÔNICA DE GASES DE ELÉTRONS 1-D EM INTERFACES SEMICONDUCTORAS COM CONTATOS MULTI-TRILHOS METÁLICOS NANOMÉTRICOS

CURY, L. A.

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais C.P. 702 30161-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

BEERENS, J.

Centre de Recherche en Physique du Solide e Departement de Physique, Université de Sherbrooke, Québec, J1K 2R1, Canadá

ADAMS, J. A.; TAYLOR, R. P.; DAVIES, M.; MARSHALL, P. A.; CHARBONNEAU, S.; SACHRAJDA, A. S.; COLERIDGE, P. T.

I.M.S., National Research Council, Ottawa, K1A 0R6, Canadá

Padrões de contato metálicos em escala nanométrica do tipo multi-trilhos são fabricados por litografia de feixes de elétrons em uma interface GaAs-AlGaAs. A estrutura multi-trilho possui um período de 400 nm com uma largura de trilho de 200 nm cobrindo uma área de 200 microns por 200 microns. Aplicando-se uma tensão negativa sob o contato multi-trilhos induz-se uma perturbação eletrostática sob o gás 2-D da interface que torna-se mais intensa sob a superfície entre o metal e o semicondutor. Fabricação de estruturas nanométricas por esta técnica apresenta inúmeras vantagens sendo a mais importante a capacidade de modulação contínua da magnitude do potencial induzido por cada trilho pelo ajuste da tensão sob os trilhos. Dessa forma o sistema pode passar de um estado não-perturbado (tensão nula), através de uma faixa de tensões onde o potencial de perturbação é menor que a energia de Fermi do gás 2-D, até maiores tensões onde depleções eletrônicas sob os trilhos ocorrem favorecendo a formação de canais unidimensionais contendo níveis eletrônicos discretos. A formação de gases de elétrons 1-D pela aplicação da tensão sob os multi-trilhos foi caracterizada por ressonância ciclotrônica. Além do pico característico de absorção do gás 2-D um pico suplementar no espectro

de transmissão foi observado e se mostrou dependente da tensão aplicada. Uma análise quantitativa da energia de separação entre os níveis discretos 1-D é feita e baseia-se na modelização do potencial perturbador por um potencial harmônico.

ASSOCIAÇÃO EM SÉRIE DE RESISTORES BALÍSTICOS

NEVES, J. M.

UFMG

MAIN, P.; EAVES, L.; HENINI, M.
Nottingham University - Reino Unido

Estudou-se a associação em série de dois contatos quânticos pontuais com separação inferior ao caminho livre médio dos elétrons. Esses resistores balísticos foram criados por "split gates" fabricados sobre uma heterojunção de GaAs-AlGaAs. Duas geometrias foram consideradas: uma contendo contatos quânticos colineares e outra com contatos perpendiculares. Mediu-se a resistência da associação e a resistência individual de cada contato quântico como função da tensão aplicada aos gates em diferentes campos magnéticos. Foi confirmado que em geral as resistências de resistores balísticos não segue a regra clássica de soma. De fato a resistência da associação pode ser consideravelmente menor que a soma das resistências dos contatos quânticos. A partir do formalismo de Landauer-Buttiker, derivou-se uma expressão geral para a resistência da associação em termos dos coeficientes de Landauer. Esses coeficientes foram calculados a partir dos resultados experimentais e mostrou-se que sua dependência na largura dos contatos quânticos e no campo magnético aplicado pode ser entendida classicamente.

DEPENDÊNCIA TEMPORAL DA REDUÇÃO NA CONCENTRAÇÃO DE DOPANTES EM ESTRUTURAS MOS APÓS EXPOSIÇÃO À RADIAÇÃO IONIZANTE

VASCONCELOS, E. A. DE; JÚNIOR, E. F. DA S.

Departamento de Física - UFPE

A geração de defeitos em estruturas Metal-Óxido-Semicondutor (MOS) tem sido objeto de intenso estudo por várias décadas. Defeitos gerados nas vizinhanças da interface SiO_2/Si são os principais responsáveis por falhas em dispositivos e circuitos de tecnologias avançadas. Neste trabalho apresentamos resultados recentes da irradiação de estruturas MOS por raios-X com energia de $40KeV$, que geram defeitos na interface SiO_2/Si e cuja consequência é a redução na concentração aparente de dopantes no silício. Esta redução se dá em larga escala dependendo da dose de radiação e apresenta uma dinâmica temporal ao longo de muitas ordens de grandeza. Discutiremos os parâmetros mais importantes que afetam a dinâmica destes defeitos, entre os

quais destacam-se: a dose total de irradiação, o tamanho do dispositivo, a distribuição de stress na interface SiO_2/Si , e a espessura do filme de óxido de silício. Os resultados indicam que a redução na concentração de dopantes nas vizinhanças da interface SiO_2/Si , está associada ao enfraquecimento e/ou quebra de ligações químicas nas suas proximidades e com a formação de armadilhas eletricamente ativas ou não. Estas, aprisionam portadores e ocasionam uma redução da concentração de dopantes. Mostraremos que estes defeitos uma vez gerados, proliferam-se nas vizinhanças da interface SiO_2/Si , degradando as características elétricas dos dispositivos até sua falha total.

Crescimento, Caracterização e Propriedades Ópticas (SEM) - 10/06/94

MEDIDA DO PRODUTO MOBILIDADE-TEMPO DE VIDA EM ESTADO ESTACIONÁRIO DOS DOIS PORTADORES NO a-Si:H USANDO A TÉCNICA DE SSPG

MISOGUTI, L.; NAKAGAITO, A. N.; RAMOS, L. R.; BAGNATO, V. S.

IFQSQ, USP - São Carlos

FRAGALLI, J. F.

Departamento de Física - Campus de Bauru - UNESP

A técnica de SSPG (Steady State Photocarrier Grating technique), atualmente largamente utilizado para medida de comprimento de difusão ambipolar dos portadores no silício amorfo hidrogenado (a-Si:H) e suas ligas, no regime de altos campos elétricos permite determinar o valor preciso do produto mobilidade-tempo de vida ($\mu\tau$) para ambos portadores. Estes dois parâmetros são de fundamental importância para as propriedades optoeletrônicas do material, μ contém informações sobre mecanismos de transporte, e τ mecanismo de cinética de recombinação. Portanto há um grande interesse de se conhecer o valor exato destas grandezas. Analizamos esta nova técnica de medida com os métodos tradicionais de fotocondutividade, que tem uma grande imprecisão devido a dificuldades inerentes de difícil solução, e comparamos os resultados e o regime de validade.

Medidas de Fotoluminescência em Poço Quântico Assimétrico de InP-InGaAs

CARDOSO, A. J. C.; MORAIS, P. C. DE

Departamento de Física Universidade de Brasília.

Apresentaremos medidas preliminares de fotoluminescência em poço quântico assimétrico simples em heteroestruturas de InP-InGaAs, crescidas por VLE ("Va-

por Levitation Epitaxy"). O objetivo do trabalho é estudar o processo de transferência de cargas entre camadas e a influência da iluminação da amostra nesses processos. As amostras têm dopagem modulada, de forma que existe um gás de elétrons quase bi-dimensional no poço quântico assimétrico. Sob iluminação, a energia de recombinação da fotoluminescência muda, indicando um decréscimo na densidade do gás de elétrons dentro do poço. Essa modificação depende da intensidade do laser incidente. Um modelo que inclui o efeito da densidade do gás de elétrons sobre o "band-bending" e na energia de correlação e troca, bem como o retorno dos elétrons ao poço quântico por tunelamento, será considerado nesse trabalho.

INVESTIGAÇÃO DA VARIAÇÃO DO GAP ÓPTICO DE SEMICONDUCTORES ATRAVÉS DA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA

SOUZA, J. C. DE

Hospital São Rafael e Instituto de Física-UFBA

MOTA, F. DE B.

Instituto de Física - UFBA, Instituto Tecnológico da Aeronáutica, São José dos Campos, SP.*

SILVA, A. V. B. DA; FARIAS, P. C. M.

Escola de Politécnica de Engenharia - UFBA

SILVA, A. F. DA

INPE/LAS - São José dos Campos, SP.

Investigamos a variação do gap Óptico de diversos semicondutores, através da técnica de espectroscopia fotoacústica. A determinação do gap óptico foi obtida pela medida da absorção. Os resultados, comparados com os obtidos por outras técnicas, apresentam excelente concordância, mostrando que a espectroscopia fotoacústica é uma boa técnica na determinação do gap fundamental de semicondutores. As medidas foram feitas por meio de um espectrômetro completo, com interfaces, inteiramente desenvolvido pelo grupo de propriedades ópticas de semicondutores do IFUFBA^{1,2}. A confiabilidade nas medidas pode ser vista e comparada com outros trabalhos^{3,4}.

*Endereço Permanente.

1. J. Caetano de Souza, Tese de Mestrado IFUFBA (1993).
2. J. Caetano de Souza et al. Proc. of the 5th. Brazilian School of Semiconductor Physics, World Scientific pg. 509 (1991).
3. J. Caetano de Souza and A. Ferreira da Silva, Proc. of the First Tropical Meeting on Photoacoustic and Photothermal Phenomena (1994).
4. O. Zelaya-Angel, J.J. Alvarado-Gil, R. Logada - Morales, H. Vargas and A. Ferreira da Silva, Appl. Phys. Letters (in press).

ABSORÇÃO ÓPTICA DE SISTEMAS SEMICONDUCTORES DUPLAMENTE DOPADOS

MOTA, F. DE B.

Instituto de Física - UFBA, Instituto Tecnológico da Aeronáutica, São José dos Campos, SP.*

SILVA, A. F. DA

INPE/LAS - São José dos Campos, SP.

CANUTO, S.; PIQUINI, P.; A. FAZZIO, A.

Instituto de Física - USP, São Paulo, SP.

Investigamos a absorção óptica do sistema semiconductor duplamente dopado $Si : P, As$. Este sistema foi usado, pela primeira vez, na determinação da transição metal isolante, através de medidas de condutividade elétrica¹. Pouco depois foi feito um modelo para estudar a transição e susceptibilidade². Não existe, portanto, outras investigações teóricas sobre este sistema, de fundamental importância para o estudo, por exemplo, de desordem. A introdução das energias de ionização das impurezas doadoras de P e As causam uma desordem vertical que é refletida na condutividade. Desenvolvemos um modelo que leva em consideração as interações eletrônicas da molécula, $H - H^*$, que simula os doadores P e As . Cálculo ab initio UHF foi utilizado para obtenção da curva de ionização. Observamos um deslocamento do pico de absorção em relação ao do sistema $Si : P$, causado por estes doadores.

*Endereço permanente.

1. P. F. Newman and D. F. Holcomb, Phys. Rev. Lett. **51**, 2144 (1983).
2. A. Ferreira da Silva, Phys. Rev. Lett. **59**, 1263 (1987); Phys. Re. **B43**, 6551 (1991).

EFEITO DA ORIENTAÇÃO DO SUBSTRATO NA CINÉTICA DE SUPERFÍCIE E ESTABILIDADE TERMODINÂMICA DE UM POÇO QUÂNTICO DE InGaAs/GaAs CRESCIDO NOS PLANOS (311) E (100).

LUBYSHEV, D.; GUIMARAES, F.; CHITTA, V. A.; MAREGA JR, E.; BASMAJI, P.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais-IFQSC-USP

O crescimento de estruturas do tipo InGaAs/GaAs é de grande interesse para confecção de dispositivos do tipo HEMTs e Lasers no infravermelho. Para estruturas crescidas nos planos (n11), existe um campo piezoelétrico natural neste sistema que pode proporcionar o desenvolvimento de uma nova classe de dispositivos optoeletrônicos. O crescimento nos planos (n11) é mais difícil quando comparado com o plano (100), devido à rugosidade da interface, anisotropia das propriedades de ambos os lados polares (n11A e n11B) e

mudança das propriedades cinéticas de incorporação dos átomos. Um problema comum que há no crescimento de poços quânticos de alta qualidade é a reevaporação e a segregação de In na interface. Neste trabalho estudamos o efeito da temperatura do substrato T_s , e da interrupção do crescimento nas interfaces superior e inferior do poço quântico através das suas propriedades ópticas. O espectro de PL (Fotoluminescência) mostra que na formação do poço a altas T_s , o efeito da segregação e reevaporação é menor no plano (311) que no (100). Uma diminuição na concentração de In no QW foi observada através do deslocamento da linha de PL em função de T_s . Os dados obtidos a partir de PL para a reevaporação de In no plano (100), apresentam um bom acordo com os obtidos diretamente a partir das oscilações RHEED durante o crescimento da liga ternária. A interrupção do crescimento na interface inferior diminui a largura do pico de PL devido ao alisamento da superfície em comparação com a crescida sem a interrupção. Ao contrário quando há a interrupção no topo da interface, a largura do pico de PL aumenta devido a segregação e, há um deslocamento do pico devido a reevaporação. Todos estes efeitos são observados com mais intensidade na orientação (100) que na (311). A maior estabilidade termodinâmica observada nos QW crescidos na orientação (311) é devido provavelmente à diferenças de tipos de ligações pendentes existentes nas duas orientações.

DETERMINAÇÃO DA POLARIDADE E PREPARAÇÃO QUÍMICA DAS SUPERFÍCIE DE GaAs (311)A E B ANTES DO CRESCIMENTO POR MBE.

LUBYSHEV, D. I.; BASMAJI, P.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais-IFQSC-USP

PREOBRASHENSKII, V. V.

ISP, Novosibirsk, Russia

MAREGA JR, E.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais-IFQSC-USP

O crescimento de heteroestruturas a partir de substratos de GaAs orientados em (311) tem um grande interesse em comparação com a orientação (100), devido à possibilidade de observação de novas propriedades ópticas e de transporte. Nesta orientação foi detectado a formação direta de fios quânticos de AlAs/GaAs, gas bidimensional de alta mobilidade e tunelamento ressonante [1-3]. A parte crítica do crescimento através da técnica de MBE é a determinação dos lados polares (311)A e B e através da formação passiva de óxido durante ataque químico sobre a superfície sem rugosidade. Neste trabalho determinamos a composição química dos líquidos reagentes que atacam apenas um dos lados A ou B da orientação (311) e o reagente para o posterior re-polimento da superfície antes do crescimento. As

soluções de HCL:CH₃COOH:H₂O, HCL:H₃PO₄:H₂O, H₂SO₄:H₂O₂:H₂O, NH₄OH:H₂O₂:H₂O atacam o lado polar B enquanto que as soluções de HNO₃:H₂O₂ e H₃PO₄:CH₃COOH:H₂O atacam o lado polar A. Para ambos os procedimentos foi determinado a velocidade de ataque nas orientações (100) e (311). A micromorfologia da superfície foi analisada com um microscópio eletrônico de varredura e o tipo e características das superfícies após o ataque foi estudada para todas as soluções. Foi estabelecido que para o posterior polimento das superfícies (311)A e B a utilização da solução de H₂SO₄:H₂O₂:H₂O na proporção de 15:1:1. Foram obtidas superfícies com qualidade de espelho para temperaturas no intervalo de 30-45 °C.

1- R. Nortzel, N.N. Ledentsov, L.Daweritz, K.Ploog, Phys. Rev. B,45(1992)p. 3507.

2- A.G. Davies, J.E.F Rfost, D.A. Ritchie, D.C. Peacock, R. Newbury, E.H. Linfield, M. Pepper, G.A.C. Jones, J.Cryst.Growth,111(1992)p.318.

3- M. Henini, R. K. Hayden, E.C Valadarez, L. Eaves, G. Hill, M.A.Pate, Semicond. Sci. Technol., 7, (1992)p. 267.

FORMATION OF INNATE INHOMOGENEITIES IN (CdHg)Te ALLOYS AND A POSSIBILITY OF THEIR OBSERVATION BY MEANS OF FIR SPECTROSCOPY

VASILEVSKIY, M. I.; ANDA, E. V.

Instituto de Física- UFF

The (CdHg)Te (CMT) alloy is a principal material for fabrication of IR photodetectors. The CMT system is known to be quite complicated from the technological viewpoint, especially for epitaxial growth, because of the great difference in physical properties of the constituents, CdTe and HgTe. Moreover, Hg interstitials which are donors and cation vacancies which are acceptors in CMT, both are usually present in the alloy and produce some native doping. So far, a significant number of publications have reported on observation of some peculiarities in the halvanomagnetic properties of CMT alloys. Some of these data were accounted for by the presence of large-scale inhomogeneities in either composition or the native-dopant concentration. We propose a mechanism of formation of the inhomogeneities based on a diffusion instability in the 'substitutional Hg atoms- Hg interstitials' interacting system. The crucial point is the strong dependence of the concentration of the cation vacancies on local composition of the alloy. We show that the instability may result in several kinds of non-uniform distribution of both Hg species, e.g. a layered structure or droplets of Hg interstitials embedded in a lightly doped CMT matrix. We analyse a FIR response from samples containing one of the following kinds of non-uniformity: (i) a simple layered structure, (ii) a cermet- like composite of topologically equivalent

constituents and (iii) a composite containing separate drops of the heavier doped material. We assume only different values of the plasmon frequency for the fragments of the inhomogeneous system. The calculated reflectivity and absorption coefficient are compared with available experimental data.

CONDUTIVIDADE PERSISTENTE EM FILMES FINOS DE CdSe QUIMICAMENTE DEPOSITADOS

MESSIAS, L. G. DE O.; CONSTANTINO, C.
Dep. Física - UFSCar

Quando a condutividade leva um tempo relativamente longo para alcançar o estado estacionário denominamos de fotocondutividade persistente. Este fenômeno está ligado à presença de barreiras de potencial na amostra. Estas barreiras são devidas a cargas situadas em estados localizados na fronteira inter-grãos. As barreiras são responsáveis pela separação do par elétron-buraco dando origem a um processo de recombinação muito lento, onde o buraco é capturado pela barreira e o elétron fica livre para conduzir. Durante nossas medidas em filmes finos de CdSe depositados quimicamente observamos que as amostras apresentavam o fenômeno da fotocondutividade persistente. Neste trabalho se faz uma análise da relaxação da fotocondutividade através de um conjunto de equações diferenciais acopladas, equações de taxa e a equação de Poisson resolvidas numericamente usando o método de Adams-Bashforth. Os primeiros resultados numéricos que obtivemos apresenta características similares em relação ao comportamento que encontramos em nossas amostras. Ajustando os parâmetros do modelo procura-se reproduzir os resultados experimentais.

Optical propagation in low-dimensional heterostructures

TUYAROT, D. E.; LATGÉ, A.

Depto. de Física, Univ. Federal Fluminense, Niteroi
CLARO, F.

Facultad de Física, Univ. Católica de Chile

A theoretical study of the light propagation^a in double-barrier and multilayered systems is presented. The case of conductor-insulator periodic and quasiperiodic arrays are discussed. The transmission coefficients as a function of the angle of incidence and the electromagnetic energy density inside the sample are calculated for different arrangements. For the double-barrier system, well defined optical resonances at the transmission coefficient are found as the length of the well is increased. In the case of an ordered multilayered system, when the number of quantum-well layers is increased the same number of resonant peaks appears. This is exactly what happens in the electronic transport in multi-well systems. The photon localization is studied

by analysing the energy density across the multilayered and a parallel is done concerning to electronic and optical transport in low-dimensional structures.

^aA. Latgé and F. Claro, *Optics Commun.* 94, 398(1992)

ESTUDOS DE ABSORÇÃO ÓPTICA EM POÇOS QUÂNTICOS DE HgCdTe/CdTe

OLIVEIRA, C. R. M. DE; PAULA, A. M. DE; CESAR, C. L.
IFGW - UNICAMP

MARQUES, G. E.
Departamento de Física - UFSCar
FELDMAN, R. D.; AUSTIN, R. F.
AT&T Bell Laboratories, Holmdel

Apresentamos medidas de absorção óptica em poços quânticos múltiplos de HgCdTe/CdTe não dopados. Medimos espectros na faixa de comprimentos de onda de 1-6 μ m. Observamos, além dos degraus típicos do confinamento quântico, um aumento acentuado na intensidade da absorção na faixa de 1-2 μ m. Este aumento inicia-se em energia próxima a energia da barreira do poço para elétrons. Cesar et al [*Appl. Phys. Lett.* 56, 283 (1990)], utilizando um modelo o qual inclui um alargamento fenomenológico, o fator de Sommerfeld e a não parabolicidade das bandas, obtiveram bons ajustes para o espectro na faixa de 2-6 μ m. Entretanto, este modelo não explica o aumento acentuado na intensidade da absorção na faixa de 1-2 μ m. Utilizando um modelo mais sofisticado, baseado no método 8×8 k · p de Kane [Cohen et al, *Phys. Rev. B* 41, 10608, 1990)] obtivemos um bom ajuste para toda a faixa medida do espectro.

ESPALHAMENTO DE LUZ E DE RAIOS-X EM SILÍCIO POROSO

RIBEIRO, E.; TORRIANI, I. L.; CERDEIRA, F.; KLEINKE, M. U.; TESCHKE, O.

Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física
"Gleb Wataghin", 13081-970 Campinas SP

Efetamos uma série de experimentos, por meio de técnicas variadas, em amostras de Silício poroso forte e fracamente luminescentes obtidas por ataque eletroquímico de substratos de Si (100) tipo p. Espectros de espalhamento Raman a temperatura ambiente foram obtidos com baixa densidade de potência de bombeio e diferentes linhas de excitação ($\lambda_L = 6471 \text{ \AA}$, 5145 \AA , 4880 \AA e 4765 \AA) provenientes de lasers de Ar⁺ e Kr⁺. Não foi observada nenhuma dependência das formas de linha experimentais com λ_L . As experiências foram realizadas com a amostra recém-preparada colocada imediatamente em vácuo e repetidas após duas semanas de exposição ao ar. Novamente, nenhuma mudança nas formas de linha foram observadas. Isto vai contra a hipótese de que o espectro Raman deveria ser

dominado pela presença de óxidos de Silício e siloxanos. Na amostra fortemente luminescente as linhas aparecem deslocadas para baixas energias e apresentam grande assimetria também para energias menores. Na fracamente luminescente verifica-se comportamento semelhante, porém bem menos pronunciado. Os resultados são comparados com cálculos teóricos do espectro Raman de grãos nanocristalinos de Si com diferentes formas geométricas. Tal comparação sugere para a morfologia da amostra altamente luminescente uma composição majoritária de microcristais cilíndricos isolados com razão comprimento/diâmetro da ordem de 3, sujeita a uma pequena tensão elástica expansiva. Essas conclusões são reforçadas por nossas medidas de raios-X. A difração de raios-X de duplo cristal ("rocking curves") confirma a presença da tensão enquanto experimentos de espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS) mostram fortes evidências da presença de cristalitos não-esféricos e de forma alongada. Estas conclusões também estão em concordância com as medidas de TEM da ref. 1.

¹ O. Teschke, M. C. Gonçalves and F. Galembeck, *Appl. Phys. Lett.* 63, 1348 (1993).

Estudo do Comprimento de Localização em a-Si:H e ligas de a-SiC:H através da Fotoluminescência Estacionária

MAGALHÃES, C. SCHMIDT DE; BITTENCOURT, C.; ROVIRA, P.; MAÇAÍBA, J. L. B.; ALVAREZ, F.
Instituto de Física 'Gleb Wataghin' - Unicamp

Em materiais amorfos as principais transições ocorrem entre os estados localizados (cauda-a-cauda ou cauda-defeito) dentro do 'gap' destes materiais. Portanto, a baixas temperaturas, crê-se que os mecanismos de recombinação entre estes estados localizados ocorrem por tunelamento, tornando interessante o estudo do comprimento de localização da função de onda do elétron nestes estados. Através da fotoluminescência estacionária (PL) em a-Si:H e ligas de a-SiC:H, estudamos as recombinações radiativas entre os estados localizados dentro do 'gap' destes materiais, e medidas de PL em função da temperatura nos dão informações sobre a competição existente entre os mecanismos de recombinação radiativo e não-radiativo. Neste trabalho, analisamos resultados obtidos pela PL em função da temperatura em amostras produzidas por 'glow discharge' em variadas condições de deposição, tais como, temperatura do substrato, diluição ou não de hidrogênio na mistura gasosa, potência rf e concentração de carbono no filme. Destes resultados obtivemos diferentes dependências da eficiência da PL em função da temperatura para cada amostra, sendo estas dependências associadas à desordem e a densidade de defeitos. Assumimos que à baixa temperatura, 77K, os processos de recombinação acon-

tecem por tunelamento e relacionamos parâmetros obtidos experimentalmente, tais como a dependência da PL com a temperatura, a energia de Urbach (relacionada a inclinação das caudas das bandas), e a densidade de defeitos (estes dois últimos parâmetros obtidos por medidas de PDS - 'Photo-Thermal Deflection Spectroscopy'), e conseguimos uma relação para o comprimento de localização, cujos resultados são apresentados e discutidos. Apoio: CNPq, CAPES e FAPESP.

Deep level photoluminescence and electrical studies on Si-doped $Al_xGa_{1-x}As$ grown by MBE

GERALDO, J. M.

Universidade Federal de Ouro Preto
RIBEIRO, G. M.; OLIVEIRA, A. G. DE
Universidade Federal de Minas Gerais

Deep level photoluminescence (PL) studies were performed on Si-doped molecular beam epitaxy (MBE) grown $Al_xGa_{1-x}As$ as a function of Al composition and Si concentration. The Al fraction was varied from 0 to 0.30 and two different Si concentration was used. The substrate temperature and arsenic pressure during growth were the same for all studied samples. In PL spectra two large deep bands were observed centered at 1.35eV and 1.79eV. By a systematic analysis these emissions were attributed to $Si_{Ga}-V_{Ga}$ and $Si_{As}-V_{As}$ complexes defects respectively. It was shown that the full width at half maximum (FWHM) of the defect band emissions diminishes when Si concentration increased. It was also shown that the peak energy position change to lower values as Si concentration increased. The FWHM of these emissions and their peak energy position is almost independent of Al fraction x.

OPTICAL PROPERTIES OF WIDE BAND-GAP II-VI HETEROSTRUCTURES

BATISTA, D. V. S.; BRASIL, M. J. S. P.

UNICAMP

TAMARGO, M. C.
City College of New York

Wide band-gap II-VI heterostructures are of major technological and scientific interest because of the possibility of fabricating optical devices acting on the blue-green region. III-V heterostructures have been extensively studied in the past. However, structures based on II-VI materials have only recently been investigated and there are still various open points that reflect on limitations of device performance. Besides, II-VI materials have unique properties that are highlighted by the quantum nature of the structures, such as a strong coupling of the excitons to the LO phonons due to their strong polarity, and a large exciton binding energy. We investigated the optical properties of various II-VI heterostructures, including two different kinds of band

alignments: ZnSe/ZnCdSe type I quantum wells and ZnSe/ZnSeTe type II superlattices. We present the results of photoluminescence, excitation photoluminescence and photorefectance, including measurements as a function of the temperature and of the applied magnetic field. We discuss the origin of the observed emissions and the effective confinement of the carriers for different band alignments, considering the special properties of II-VI materials described above.

CONTRIBUIÇÃO PARA O ESTUDO DE AMOSTRAS DE GaAs FORTEMENTE DOPADAS COM CARBONO.

MENDES, W. M.; SOUZA, P. L. DE
CETUC - PUC-Rio
SERMAGE, B.

Centre National d'Etudes des Telecommunications - France

Devido a sua baixa difusividade em GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$, o Carbono tem sido utilizado como um novo dopante tipo *p* nesses materiais, substituindo com vantagem os dopantes convencionais como o Be, o Mg e o Zn, principalmente em dispositivos que requerem junções por estreitas e abruptas, como por exemplo o transistor bipolar de heterojunção (HBT). Pelo fato de pertencer ao mesmo grupo da tabela periódica que o Si, o qual introduz um nível doador raso em GaAs, seria esperado para o Carbono um comportamento semelhante. Porém, o que se observa é que o Carbono se comporta como um dopante tipo *p*, introduzindo um nível aceitador raso ($E_A \simeq 26$ meV) em GaAs, e portanto incorporando-se predominantemente em sítio As, C_{As} . Cálculos recentes, contudo, indicam para a possibilidade da formação do C_{Ga} , o qual daria origem a um centro profundo e não a um doador raso. Esse comportamento diferenciado do Carbono em relação ao Si motivou um estudo sistemático de camadas epitaxiais de GaAs fortemente dopadas com Carbono, visando a avaliação de algumas propriedades óticas, elétricas e morfológicas. Serão apresentados espectros de fotoluminescência, medidas do efeito Hall e do perfil Capacitância-Voltagem (C-V) e os valores do parâmetro de rede obtidos por difração de raios-X. Apresentaremos também os efeitos do recozimento na concentração de portadores, no parâmetro de rede e nas emissões radiativas.

TRANSIÇÕES ÓPTICAS EM UM SISTEMA DE GÁS BI-DIMENSIONAL DE ELÉTRONS

ABBADE, M. L. F.; IKAWA, F.; BRASIL, M. J. S.
P.; BRUM, J. A.
UNICAMP

BENUSSI, A. A.; OLIVEIRA, R. G.
CPqD-Telebras
BORGHIS, G.
IMEC-Leuven

Neste trabalho, nós apresentamos o estudo de um gás bi-dimensional de alta densidade de elétrons sob a influência da interação coulombiana originada da segunda sub-banda eletrônica. Nossas amostras consistem de um poço quântico de InGaAs/GaAs/AlGaAs com dopagem modulada. Para analisarmos este sistema, realizamos medidas de foto-luminescência, foto-luminescência de excitação e magneto-luminescência em diferentes temperaturas e com diferentes condições de excitação. As medidas de foto-luminescência a 2K mostram a presença de dois picos associados, respectivamente, às recombinações do estado fundamental ($e1$) e do primeiro estado excitado do elétron ($e2$) com o estado fundamental do buraco pesado ($h1$). Com o aumento da temperatura de 2 a 50K, observamos um pico adicional aproximadamente 8 meV abaixo da linha ($e2-h1$). Resultados similares são obtidos em experimentos de foto-luminescência realizados com diferentes potências de excitação. A posição de energia desse pico /é compatível com a transição associada a singularidade do nível de Fermi. Por outro lado, a observação desse pico em temperaturas relativamente altas (15 a 30K) contradiz esta identificação. Outras possíveis interpretações para o pico adicional, tais como o acoplamento do gás bi-dimensional de elétrons com os estados confinados da dopagem planar da barreira estão sendo analisadas.

Excitons in low-dimension semiconductor heterostructures

COSTA, I. F.; BRUM, J. A.
Instituto de Física - DFESCM - UNICAMP, Cx.P. 6165,
13083-970 Campinas (SP)

We present here a study of the excitonic states in low-dimension semiconductors following a center-of-mass description. This work attempts to describe the exciton states in large width III-V quantum wells and/or large-gap II-VI quantum wells. In the latter case, the large gap and consequently small dielectric constant makes the exciton radius quite small (in the order of few tens of Angstrom). In both cases, we may have a situation where the exciton radius is quite smaller than the well width. The carriers confinement description is strongly mixed by the Coulomb interaction and loses its characteristics. An interpretation in terms of the exciton center-of-mass confinement is more appropriate. We will discuss the energy levels as well as the selection rules and oscillator strengths for several systems. The presence of an external magnetic field will also be discussed.

GALLIUM ACCEPTOR DOPING OF HYDROGENATED AMORPHOUS GERMANIUM.

COMEDI, D.; FAJARDO, F.; CHAMBOULEYRON, I.
UNICAMP

Gallium atoms have been incorporated to hydrogenated amorphous germanium (a-Ge:H) thin films by the co-sputtering of solid gallium and germanium targets in an rf-sputtering deposition system. The Ga atomic concentration of the films was varied from 3×10^{-5} to 1×10^{-2} by varying the Ga-to-Ge relative areas. It was found that the dark conductivity at room temperature of the films changes by about 3 orders of magnitude within the studied composition range, indicating doping is occurring. The conductivity changes from n-type (for the undoped and lightly Ga-doped samples) to p-type for Ga atomic concentrations higher than approximately 1×10^{-4} , as deduced from measurements of the sign of the thermopower. The hydrogen content and the optical gap of the doped films as determined from optical absorption measurements, on the other hand, remain essentially unchanged with respect to the undoped material. The results obtained therefore indicate that effective p-type doping of sputtered a-Ge:H films can be reproducibly achieved with the use of Ga solid sources. For Ga atomic concentrations approaching 1×10^{-2} , however, signs of metallic segregation are detected on the surface of the films. Raman spectra measured for the most doped samples show no evidence for microcrystallinity.

DETERMINAÇÃO DA DESCONTINUIDADE DE BANDA EM JUNÇÕES INAS% :TE:GAAS.

RODRIGUES, W. N.

Depto. Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

ETGENS, V.; SAUVAGE-SIMKIN, M.; ROSSI, G.; SIROTTI, F.; PINCHAUX, R.

LURE, CNRS-CEA-MENJIS, Centre Universitaire Paris-Sud

Recentemente foi demonstrado que a presença de aproximadamente uma monocamada de Te na superfície do GaAs(100) induz um crescimento camada a camada do InAs, ao invés do crescimento por ilhas observado para espessuras maiores que 1,5 monocamadas de InAs. O crescimento é pseudomórfico até 6 monocamadas, apresentando um relaxamento do filme, mas mantendo ainda um crescimento uniforme. A origem do fenômeno é ainda controversa, alguns autores considerando o Te como um surfactante; outros admitindo a formação de uma camada intermediária, que atuaria como camada tampão elástica. Aqui serão apresentadas, para diversas espessuras do filme de InAs, medidas de fotomissão, usando luz síncrotron e a linha HeII, dos níveis

eletrônicos Ga3d e In4d, além da banda de valência. A descontinuidade das bandas na junção dos dois materiais é obtida da distância entre os níveis de caroço e o máximo da banda de valência. Observa-se aqui que a descontinuidade de banda depende da espessura do filme de InAs, como revelado pelo deslocamento relativo do nível In4d em relação ao Ga3d. Essa variação satura-se em 0,26 eV para coberturas entre 5 e 8 monocamadas de InAs. Serão discutidos dois modelos para esse efeito, considerando a tensão no filme e o curvatura de banda devido a superdopagem pelo Te.

GROWTH MODE TRANSITION OBSERVATION ON TEMPERATURE DEPENDENCE OF RHEED OSCILLATION.

LUBYSHEV, D. I.; GONZALEZ, P. P.

IFQSC-USP

PCHELYAKOV, O.; PREOBRAZHENSII, V.

ISP, Novosibirsk, Russia

BASMAJI, P.

IFQSC-USP

Growth mode in MBE has been considered available technique to understand the growth mechanism of the structure devices like serpentine and tilted superlattices. However, the growth mode depends of supersaturation ratio of adatoms which change as a function of the substrate temperature (T_s). In this work we report the growth temperature effect on the amplitude and the decay of RHEED intensity oscillations during GaAs growth. We analyze oscillation amplitude in functions of T_s by using the exponential formula: $A = A_0 \exp(\sigma)(\cos \omega t)$, where A_0 is the amplitude of first oscillation, σ - is the decay factor and ω is the oscillation frequency. We deduced different growth modes like step flow, mixing step flow - 2D synchronized nucleation, 2D - synchronized nucleation and non synchronized nucleation growth, when T_s was reduced from 620° to 430° C. The change of the growth mode can be related to the increasing of supersaturation ratio. At high temperatures exist competition between adatoms incorporation in the terrace steps and 2D-synchronized nucleus, contrary to low temperature when there is competition between 2D-synchronized nucleus.

ON THE SILICON PLANAR-DOPED EFFECTS FOR EITHER IN THE GaAs OR IN THE AlGaAs LAYER NEAR A GaAs/AlGaAs INTERFACE

OLIVEIRA, A. G. DE

Depto. Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

CARVALHO, A. T. G. DE

Depto. Física, Universidade Federal de Viçosa, M.G.

MOREIRA, M. V.; MAZZONI, M. S. C.; CHACHAM, H.; FERNANDES, A. O.

Depto. Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais.

Hall concentration and mobility were measured for samples having a silicon planar-doped layer either in the GaAs layer or in the AlGaAs layer near a GaAs/AlGaAs interface. The effects of the silicon concentration, substrate temperature and the spacer were analysed. The spacer being the distance the ideal localization of the planar-doped layer and interface. Hall measurements were carried out at both 300K and 77K in darkness and under illumination using an infrared LED as light source. Photoexcited effects indicate the presence of silicon in unintentionally doped layers and the silicon spread could be analysed using the persistent photoconductivity (PPC) effect. The DX center which is responsible for the PPC effect could therefore be used as a probe to investigate both the silicon profile and the multiple-band conduction effects. Self-consistent structure calculations, in the effective-mass approximations, were performed assuming doping profiles that simulate the samples. The calculations show that parallel conduction occurs in various circumstances, that are consistent with the Hall measurements.

Avaliação de propriedades ópticas e estruturais pelas técnicas de Fotoluminescência e Raio-X

DEMENICIS, L. DA S.

Pontifícia Universidade Católica-RJ/CETUC

CAMPOS, J. B. DE

Pontifícia Universidade Católica-RJ/Departamento de Metalurgia

SOUZA, P. L. DE; WEID, J. P. V. D.; BASTOS, P. L.

Pontifícia Universidade Católica-RJ/CETUC

A fim de crescer amostras de InGaAs perfeitamente casadas com InP, foram produzidas diversas amostras através da técnica de MOCVD variando parâmetros de crescimento. Através de medidas de fotoluminescência e raio-X foram avaliadas a composição da liga formada, a energia do gap e a qualidade cristalina da heteroestrutura. As medidas de fotoluminescência foram feitas sistematicamente para duas temperaturas de 300K e 77K. As medidas de raio-X foram realizadas por difratometria de duplo cristal, utilizando-se a técnica de "rocking curve". Os resultados da fotoluminescência e raio-X foram de extrema importância pois juntamente com expressões empíricas relacionando o gap de energia com a concentração de In possibilitaram a obtenção desta concentração. O estudo comparativo dos resultados obtidos por fotoluminescência e raio-X permitiu a otimização das condições de crescimento de poços quânticos múltiplos tanto de InGaAs quanto de InGaAsP. Este trabalho foi realizado sob a égide do contrato PUC-Telebrás 513/93.

Propriedades ópticas de uma estrutura de poços quânticos de InP/InGaAs/InP/InGaAsP/InP/InGaAs/InP

DEMENICIS, L. DA S.; SOUZA, P. L. DE

Pontifícia Universidade Católica-RJ/CETUC

CAMPOS, J. B. DE

Pontifícia Universidade Católica-RJ/Departamento de Metalurgia

WEID, J. P. V. D.; BASTOS, P. L.

Pontifícia Universidade Católica-RJ/CETUC

É possível crescer poços quânticos múltiplos de InGaAsP sobre InP com diversas concentrações casadas, produzindo uma faixa de valores para o gap de energia entre 1.35eV e 0.75eV que é a faixa de interesse para aplicações em dispositivos ópticos. Esta faixa espectral contém a região de menor perda e dispersão dos sistemas de fibra óptica. Foi criada uma amostra de poços quânticos múltiplos de InGaAsP/InP por MOCVD constituída de três poços quânticos: um poço central de InGaAsP e dois laterais de InGaAs com espessuras distintas, separados por uma barreira de InP de aproximadamente 250Å. A análise desta estrutura foi feita através de medidas de fotoluminescência e raio-X que possibilitaram a avaliação de importantes parâmetros tais como: energia do gap, composição da liga formada e qualidade cristalina da heteroestrutura. Foram observados três picos de fotoluminescência, cada um provindo de um poço. As medidas de fotoluminescência atestam a boa qualidade dos poços quânticos e nos fornecem ainda, dados importantes sobre a dinâmica de portadores nesse tipo de estrutura. Este trabalho foi realizado sob a égide do contrato PUC-Telebrás 513/93.

Aplicação de simulação de curvas de difração de raios X em múltiplos poços quânticos (MQW) de InGaAs/GaAs crescidos por CBE

SOUZA, C. F. DE; CARVALHO JR, W. DE

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento -

CPqD/TELEBRÁS

CARVALHO, M. M. G. DE; PUDENSI, M.; MENEZES, E.

Laboratório de Pesquisa em Dispositivos, IFGW, UNICAMP

A difratometria de raios X de duplo cristal é uma técnica de fácil aplicação e bastante útil na caracterização de camadas de materiais semicondutores crescidos epitaxialmente. No estudo de amostras com várias camadas, superredes ou múltiplos poços quânticos, é necessário o uso de simulação das curvas de difração para obter a composição das ligas crescidas e as espessuras das camadas individuais. Neste trabalho, serão apresentados resultados obtidos com a simulação baseada em modelo cinemático na caracterização de amos-

tras com 10 poços quânticos de InGaAs/GaAs crescidas no reator CBE/UNICAMP, assim como as curvas experimentais e os resultados de medidas feitas por Espectroscopia de Massa de Íons Secundários (SIMS).

A INFLUÊNCIA DE PLASMONS NO ESPECTRO DE LUMINESCÊNCIA DE SEMICONDUTORES DE GAP DIRETO

COSTA FILHO, R. N. DA; FREIRE, V. N.; SAMPAIO, A. J. DA C.

Universidade Federal do Ceará

A contribuição do acoplamento elétron-plasmon para o espectro de fotoluminescência de semicondutores de gap direto altamente excitados é calculada. Os portadores fotoexcitados são descritos como um sistema acoplado de portadores e plasmons segundo o hamiltoniano de Teitler, MacCombe, e Wagner. O espectro de fotoluminescência é obtido utilizando-se funções de Green de dupla dependência temporal no formalismo de Zubarev. As equações são desacopladas através da aproximação das fases aleatórias e resolvidas de forma autoconsistente. Para o caso específico do CdS, observamos que o acoplamento elétron-plasmon é responsável por um deslocamento da banda P da ordem de 25 meV para regiões de baixa energia, bem como pelo surgimento de distorções no espectro na região de alta energia. A dependência do espectro de fotoluminescência com a temperatura e a densidade de portadores é calculada, e concorda com resultados experimentais encontrados na literatura.

A INTERAÇÃO COULOMBIANA E O ESPECTRO DE LUMINESCÊNCIA DE SEMICONDUTORES FOTOEXCITADOS

COSTA FILHO, R. N. DA; FREIRE, V. N.; SAMPAIO, A. J. DA C.

Universidade Federal do Ceará

Efeitos da interação coulombiana entre elétrons e buracos no o espectro de luminescência de semicondutores fotoexcitados são estudados. O cálculo da contribuição da interação coulombiana é realizado através da utilização de funções de Green de dupla dependência temporal no formalismo de Zubarev. As equações são desacopladas pela aproximação das fases aleatórias, e são solucionadas de forma autoconsistente. Dentro deste contexto, a função dielétrica do plasma de elétrons e buracos surge naturalmente, o que mostra sua importância para o espectro de fotoluminescência. Os resultados obtidos mostram um pequeno deslocamento do pico de luminescência para regiões de energias mais baixas, um alargamento considerável do espectro e uma modificação acentuada da inclinação do lado de mais alta energia do espectro. Finalmente, um estudo da variação da luminescência com a temperatura e a densidade dos portadores é apresentado.

PADRÕES DE CRESCIMENTO INTERFACIAL E TRANSMISSÃO EM HETEROJUNÇÕES $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$

RIBEIRO FILHO, J.; FARIAS, G. DE A.; FREIRE, V. N.

Universidade federal do Ceará

A modelagem de padrões de crescimento das interfaces de heterojunções $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ é realizada. Crescimentos acelerados, retardados, suaves, e com componente aleatória da fração molar de alumínio na interface de heterojunções $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ são estudados, e para cada um deles é associado um potencial e uma massa efetiva dependentes da posição na região interfacial. Mostra-se que coeficientes de transmissão calculados para os diferentes padrões de crescimento apresentam dependência com o tipo de crescimento interfacial. Comparações com o coeficiente de transmissão de uma heterojunção $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ abrupta indicam, para cada caso, a largura máxima da interface permitida para que uma dada técnica de crescimento possa afirmar ter controle de deposição a nível de monocamadas. Finalmente, efeitos do grau de rugosidade na interface nas propriedades de transmissão de heterojunções $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ não abruptas são apresentadas.

FOTOCONDUTIVIDADE EM n-GaAs:O DE BAIXA RESISTIVIDADE

MACHADO, W. V.; AMATO, M. A.

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

Temos observado amostras "bulk" de GaAs:O no intervalo de temperaturas 40K a 300K em vários regimes de iluminação secundária. Nossos resultados cotejados com o modelo de "bola de bilhar" para a seção de choque óptica (Ridley J.Phys C 13-1980), indicam a ocorrência de cinco níveis de impureza no gap proibido: 0.15eV, 0.23eV, 0.41eV, 0.77eV e 1.03eV. A fotoresposta do material sob iluminação com comprimentos de onda fixos em função da temperatura, mostrou um interessante processo de "quenching" que acreditamos estar ligado aos efeitos metaestáveis fotogerados pela intensa iluminação prévia. A fotoresposta em função da iluminação secundária mostrou dois regimes de dependência com a intensidade luminosa: Um regime para intensidades mais baixas onde a fotoresposta cresce monotonicamente com a intensidade da luz secundária e um segundo onde a fotoresposta decresce monotonicamente com a intensidade quando esta é suficientemente elevada.

**ORGANIZAÇÃO LOCAL NOS
SEMICONDUCTORES TERNÁRIOS
 CdS_xSe_{1-x} POR ABSORÇÃO DE RAIOS-X.**

RAMOS, A. Y.

IFGW, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil e

LMCP-CNRS, Paris, França

LEVELUT, C.; PETIAU, J.

LMCP-CNRS, Paris, França

Os compostos CdS_xSe_{1-x} possuem a qualidade tecnologicamente atraente de ter um gap óptico na região do visível que pode ser variado continuamente controlando o parâmetro x . Para todo valor de x os compostos CdS_xSe_{1-x} cristalizam numa estrutura wurtzita e os parâmetros da cela mudam quase linearmente com o valor de x . Em uma escala atômica, porém, espera-se uma relaxação dos comprimentos de ligação visando manter em redor dos átomos calcogênios uma camada de coordenação parecida à dos compostos CdS e $CdSe$. A amplitude da relaxação foi obtida a partir da análise do sinal EXAFS devido aos primeiros vizinhos nas bordas de absorção K do selênio e do enxofre e bordas K e L do cádmio. Os resultados experimentais estão de acordo com as predições dos modelos e com resultados anteriores em semicondutores de estrutura zinc-blenda. Além disso a possibilidade de uma segregação em escala atômica dos átomos calcogênios de cada tipo (Se e S) foi estudada a partir da análise do sinal EXAFS devido aos segundos e terceiros vizinhos dos átomos de selênio. Não se evidenciou nenhum desvio da distribuição aleatória de átomos calcogênios dentro da rede. RHAÉ-CNPq.

**ESTUDOS MAGNETO-ÓTICOS DAS
TRANSIÇÕES EXCITÔNICAS DE POÇOS
QUÂNTICOS DE GaAs/GaAlAs COM
MODULAÇÃO DE DOPAGEM TIPO N.**

MONTANHER, V. C.; LEVIN, A.; CESCHIN, A. M.;
QUIVY, A. A.; SILVA, E. C. F. DA

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Estamos investigando poços quânticos de GaAs/GaAlAs com modulação de dopagem tipo n crescidas por "Molecular Beam Epitaxy" (MBE), utilizando as técnicas experimentais de fotoluminescência e fotoluminescência-excitação em função de campo magnético. Estas estruturas são formadas pela superposição de camadas alternadas de Arseneto de Gálio (GaAs) e Arseneto de Gálio Alumínio (Al-GaAs) nas quais é introduzida uma forte dopagem em uma dada região da liga. Esta técnica de crescimento possibilita a criação de semicondutores com alta densidade de elétrons livres (até 10^{13} elétrons/cm²) os quais estão espacialmente separados dos dopantes, resultando em semicondutores com alto valor de mobilidade (até

10^6 cm²/V.s a 4 K). A presença de portadores livres altera de maneira significativa as propriedades eletrônicas dos poços quânticos. Por exemplo, ela causa renormalização da largura da faixa proibida devido a efeitos de muitos corpos, deslocamento Moss-Burstein entre os espectros de emissão e absorção, efeitos de blindagem, entre outros. O mar de Fermi é também responsável pelo desaparecimento de estados excitônicos. Cálculos teóricos demonstram que abaixo de uma concentração crítica de elétrons, ρ_c , a luminância associada à recombinação dos portadores tem caráter puramente excitônico; e que para concentrações $\rho > \rho_c$ a luminância passa a ser dominada pela recombinação de portadores livres. Apresentaremos, portanto, neste trabalho, nossos estudos sobre os processos de recombinação de elétrons livres em função da densidade destes portadores.

**SUBSTRATOS MONO-CRISTALINOS DE
DIAMANTE PRODUZIDOS A PARTIR DA
IMPLANTAÇÃO IÔNICA E SUBSEQÜENTE
ELETRÓLISE DE DIAMANTES NATURAIS.**

PAIKH, N. R.; MCGUCKEN, E.; PATNAIK, B. K.

*Department of Physics and Astronomy, Univ. of North
Carolina at Chapel Hill*

DUNN, J. D.

Solid State Division, Oak Ridge National Laboratory

FREIRE JR, F. L.

Departamento de Física - PUC-Rio

Uma das maiores limitações para a produção de dispositivos eletrônicos em diamantes é o custo elevado destes substratos. Nas diferentes tentativas de produção de substratos a um custo mais reduzido, o uso da implantação iônica tem sido sempre uma ferramenta muito importante. Neste trabalho são apresentados resultados da análise por RBS-Channeling (2 MeV-He⁺ e 1.5 MeV-H⁺), TEM e espalhamento Raman de amostras de diamante natural implantados com íons de carbono e de oxigênio com energia de 200 keV e 5 MeV, respectivamente, com doses entre 8×10^{15} a 4×10^{17} íons/cm², antes e depois de tratamento térmico em vácuo a 950°C durante 60 minutos. É traçada a correlação entre os parâmetros da implantação iônica e a subseqüente remoção ("single crystal diamond plate lift-off") por eletrólise de lâminas de diamante com 2 μ m de espessura e baixa densidade de defeitos. Estas lâminas de diamante têm sido utilizadas como substratos para o crescimento epitaxial de filmes espessos ($\sim 10 \mu$ m) de diamante.

ANÁLISE COMPOSICIONAL E ESTRUTURAL DE AMOSTRAS ENVELHECIDAS DE SILÍCIO POROSO.

FREIRE JR, F. L.

Departamento de Física - PUC-Rio

MARIOTTO, G.; ZIGLIO, F.

Dipartimento di Fisica, Università di Trento - Itália

Neste trabalho são apresentados resultados da análise superficial de amostras envelhecidas de Silício-Poroso (SP), com diferentes graus de porosidade (65 e 85%), com a utilização de técnicas nucleares: ERDA, RBS, Channeling e Reações Nucleares. A análise estrutural é feita com micro-Raman. Resultados de fotoluminescência também serão discutidos. A análise química indica a presença de considerável quantidade de oxigênio, carbono e hidrogênio na superfície das amostras estudadas. A análise Raman revela diferentes microestruturas das camadas de SP, que emitem no visível com eficiências muito diferentes e com máximo de fotoluminescência diversos. Uma correlação entre a análise composicional e a microestrutura permite interpretar os diferentes aspectos do espectro de emissão de luz. O "blue-shift" observado no espectro de luminescência da amostra com menor porosidade é explicado com o maior consumo de silício durante o processo de envelhecimento da amostra.

Effect of alloy disorder and structural defects on exciton properties in lattice-matched (100)- and (311)-oriented InGaAs/GaAs quantum wells

GUIMARÃES, F. E. G.; LUBYSHEV, D.; SIBRÃO, E. R.; CHITTA, V. A.; BASMAJI, P.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP

Photoluminescence (PL), photoluminescence excitation (PLE) and Raman spectroscopy are used to analyse the properties of pseudomorphic InGa_{1-x}As/GaAs quantum well (QW) structures. Strained QW's with different thicknesses (2nm < Lz < 10nm) are grown by molecular beam epitaxy side by side on (100)-, (311)A- and (311)B-oriented GaAs substrates. There are significant differences in the optical properties and growth kinetic of samples having the two inequivalent (311) and the (100) surfaces. PL spectra at 17 K observed in this work from 3 nm In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs single QW's show high quality QW's and extremely narrow gaussian shaped excitonic emissions with linewidth of about 0.8 meV for both (311)- oriented samples. However, all orientations have different dependence of the luminescence linewidth on the well width. For the (311)A sample, the observed Lz dependence of the linewidth is a common feature of InGaAs/GaAs QW's and is well explained in terms of an inhomogeneous broadening of the excitonic states by alloy scattering mechanisms. Indeed, according to our growth conditions used we expect very low contribution of interfacial scattering mechanism. These

results show further that the alloy disorder in the InGaAs well is higher in the (100)-orientation than in the (311)A ones. In the case of the (311)B- orientation the broadening of the excitonic linewidth is limited not only by alloy disorder but also by defect-related mechanisms. Raman and PL measurements on highly strained multiple quantum well structures also reveal different strain states and different mechanisms of lattice-match accommodation in the three orientations studied here. We observe that the InGaAs layers with (311)A-orientation are more stable in terms of elastic strain accommodation than by generating misfit dislocations. According to the above findings, we state that the different alloy and defect states are originated in the different growth mechanism on the three inequivalent (311)- and (100) surfaces.

ESTUDO DE DEFEITOS METAESTÁVEIS INDUZIDOS POR RAIOS-X EM FILMES DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO

FRAGALLI, J. F.

Departamento de Física - Campus de Bauru - UNESP

MISOGUTI, L.; NAKAGAITO, A. N.; RAMOS, L. R.;

BAGNATO, V. S.

IFQSQ, USP - São Carlos

Filmes de silício amorfo hidrogenado preparados por descarga luminescente a 60 Hz foram submetidos a radiação eletromagnética de alta energia (Raios-X na faixa de 1.5 keV). A radiação provoca o surgimento de defeitos metaestáveis no filme, similares àqueles provocados por luz visível, conhecido na literatura por Efeito Staebler-Wronski. Os valores da energia de ativação da condutividade aumentam após a irradiação, indicando um abaixamento do Nível de Fermi; o valor do "Urbach edge" também aumenta, indicando o aumento na densidade de defeitos no "gap". As propriedades originais do filme são recuperadas após recozimento do filme em torno de 150 C. Propriedades elétricas relacionadas ao transporte de portadores, e propriedades ópticas relacionadas à estrutura dos filmes foram medidas em três situações: antes da irradiação, após a irradiação, e após o recozimento.

EFEITOS DA RADIAÇÃO DE ALTA ENERGIA EM InP E InGaAs

RIBAS, P. R. F.

IME-RJ/UFF-RJ

BELLINI, J. V.

IME-RJ

SOUZA, P. L.; MENDES, W. M.

CETUC/PUC-RJ

A determinação das propriedades dos compostos semicondutores sujeitos à radiação é relevante devido ao fato de tal exposição provocar mecanismos de degradação, ao introduzir centros de recombinação não-radiativos,

causando falhas em dispositivos. O principal objetivo deste trabalho foi investigar os efeitos da exposição de compostos semicondutores à radiação de alta energia bem como sua eliminação através de adequado tratamento térmico. Dois materiais semicondutores compostos do grupo III-V foram estudados: fosfeto de índio e arseneto de gálio e índio, ambos com propriedades adequadas para aplicações optoeletrônicas. Substratos de fosfeto de índio dopado com estanho (InP:Sn) tipo-n, com alta concentração de portadores, foram expostos, em diferentes experimentos, à irradiação com elétrons de alta energia (3.8 MeV a 300 K), e à radiação gama (1-3.8 MeV a 77 K), e recozidos à temperatura ambiente e a 473 K. Análise dos espectros de fotoluminescência e das medidas de efeito Hall, mostraram uma acentuada queda na eficiência da fotoluminescência bem como um aumento na resistividade e queda na concentração de portadores, nas amostras irradiadas com elétrons, enquanto para amostras irradiadas com raios-gama, a 77 K e caracterizadas por fotoluminescência à mesma temperatura, verificou-se o favorecimento de transições envolvendo níveis de energia menores que a banda proibida do material. Substratos de InP:S e camadas epitaxiais de InP crescidas por MOCVD estão sendo investigadas, e os resultados serão discutidos. Camadas epitaxiais de InGaAs crescidas sobre um sistema multi-estágio em substratos de GaAs, foram expostas radiação gama a 77 K. Medidas de fotoluminescência à mesma temperatura indicaram que as camadas de InGaAs não sofreram variações observáveis para as doses de radiação empregadas.

Fotoluminescência de gases de buracos bidimensionais em GaAs com dopagem planar do tipo p

DIAS, I. F. L.; DUARTE, J. L.

UEL

LAURETTO, E.; OLIVEIRA, J. B. DE; MENEZES, E.

A.

UNICAMP

OLIVEIRA, A. G.

UFMG

Camadas ultrafinas de átomos dopantes do tipo doador ou aceitador em materiais semicondutores podem ser produzidas por técnicas de crescimento epitaxial como MBE ou CBE. Esta concepção de dopagem - denominada dopagem planar - introduz uma região de carga espacial no material que cria um poço de potencial com uma estrutura de sub bandas para gases de elétrons (ou de buracos) bidimensional. Estas estruturas mostram propriedades eletrônicas interessantes e numerosas aplicações em dispositivos semicondutores. Espectroscopia por fotoluminescência, largamente empregada no estudo de propriedades fundamentais de gases de elétrons em heteroestruturas moduladas por dopagem ou poços quânticos, são pouco eficientes para estruturas com dopagem planar do tipo n em função do potencial repulsivo para portadores minoritários (buracos) fotogerados. Em contraste, em estruturas com dopagem planar do tipo p é possível observar o espectro das recombinações radiativas associadas a estrutura de subbandas. Neste trabalho mostramos os resultados obtidos para amostras de GaAs com dopagem planar do tipo p (Be) preparadas pela técnica de MBE.

SUPERCONDUTIVIDADE

Preparação e Caracterização (SUC) –
08/06/94

THERMAL FLUCTUATIONS AND FLUX LATTICE MELTING IN EXTREME TYPE II SUPERCONDUCTORS

KES, P. H.

Kamerlingh Onnes Laboratorium, Leiden University, P.O.Box 9506, 2300 RA Leiden, The Netherlands

Recent studies on layered superconductors of high anisotropy showed that we have to reconsider our textbook knowledge of the mixed state. Thermal fluctuations wash out the mean-field transition line $B_{c2}(T)$, the magnetic properties seriously deviate from the predictions of Abrikosov, the vortex lattice melts, etc. In this talk recent experimental results on high temperature superconductors and artificial multilayers will be presented and discussed. They illustrate the new exciting phenomena.

OXIDOS SUPERCONDUTORES CONTENDO GRUPOS SULFATO E FOSFATO.

DOMINGUEZ, A. B.; SCORZELLI, R. B.;
BAGGIO-SAITOVICH, E.; GIORDANENGO, B. G. H.;
ELMASSALAMI, M.

CBPF

Anions carbonato podem ser substituídos em estruturas perovskita contendo Cu, produzindo fases supercondutoras. A utilização de outros oxí-anions com comportamento similar foi reportada mostrando que íons sulfato e fosfato foram incorporados na estrutura do $YSr_2Cu_3O_7$ formando novos materiais supercondutores com temperaturas críticas na faixa de 45 a 60 K. A substituição simultânea de Y^{3+} por Sr^{2+} ou Ca^{2+} injeta "lacunas" nas camadas de CuO_2 , resultando na mudança de um estado antiferromagnético a um estado superconductor. Estes materiais contêm não apenas novas camadas tipo reservatórios de carga, mas também novas camadas supercondutoras CuO_2 com Cu tetracoordenado (como no sistema Nd_2CuO_4) e Cu penta-coordenado como no sistema $YBa_2Cu_3O_7$. As amostras foram caracterizadas por difração de raios-X e medidas de resistividade elétrica e susceptibilidade magnética AC. Medidas Mössbauer ^{57}Fe foram realizadas e os componentes do espectro podem ser relacionados a diferentes sítios de Cu e a vacâncias de oxigênio.

Structural, magnetic, and transport properties of polycrystalline $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ obtained from a sol-gel precursor

BARBETA, V. B.; JARDIM, R. F.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

BEN-DOR, L

Department of Inorganic and Analytical Chemistry,

Hebrew University Israel

MAPLE, M. B.

Department of Physics, University of California, San Diego, USA

Polycrystalline samples of $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0 \leq x \leq 0.17$) obtained from a sol-gel precursor were sintered below the eutectic temperature and reduced under different conditions. From the results of x-ray powder diffraction, the T'-structure is preserved for Ce content up to $x = 0.17$. A decrease in the lattice parameter c and a small increase in the lattice parameter a were observed with increasing Ce concentration. Electrical resistivity measurements performed in reduced samples with $x \geq 0.12$ reveal superconducting properties below 25 K. We also found that all the reduced samples display a remarkable double resistive superconducting transition and that the zero resistance state is achieved through two distinct drops in the electrical resistivity. The first drop occurs at an upper temperature T_{ci} and the second one at a lower transition temperature T_{cj} . Increasing excitation current only affects the electrical resistivity behavior below the lower transition temperature, suggesting that Josephson coupling develops at T_{cj} . The upper transition temperature T_{ci} has a maximum at $x = 0.14$ which is reduction process independent. The lower transition temperature T_{cj} is evident for reduced samples with Ce content $x \geq 0.14$ and it monotonically decreases with increasing Ce concentration. Magnetic susceptibility measurements confirm bulk superconductivity in several samples. Also, a significant diamagnetic contribution is only observed for temperatures below T_{cj} . The diamagnetic signal at 5 K strongly decreases with increasing magnetic field. The results are discussed within the framework of a granular superconducting model. (Work Supported by FAPESP and RHAE/CNPq)

SUBSTITUIÇÃO DE CuO POR AS ($A = Fe, Ni$ e Zn) EM $YBaCuO$

AGUIAR, J. A.; FERREIRA, J. M.; RAMOS, A. S.;
BARBOSA, M. V.

Departamento de Física - UFPE

PAVÃO, A. C.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

CHAVIRA, A.

Departamento Tecnico de Estado Solido y Criogenia,

I.I.M.-U.N.A.M.-México-DF,

KURMAEV, E. Z.

Institute of Metal Physics, Ekaterinburg - Russia

O efeito da substituição de CuO por AS com $A = Fe, Ni$ e Zn em cerâmicas supercondutoras de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (123) é estudado através de medidas de resistividade, susceptibilidade ac , magnetização, difratometria e espectroscopia de emissão de raios X, e titulação iodométrica - para diversas concentrações dos dopantes e diferentes tratamentos térmicos. Para pequenas dopagens de AS observa-se um comportamento metálico para resistividade e uma transição supercondutora estreita. Para dopagens elevadas de AS a transição se larga e a amostra passa a ter um comportamento semiconductor. A transição diamagnética apresenta as mesmas características da transição resistiva. Observa-se um decréscimo da temperatura de transição (T_c) com o aumento da concentração de dopantes. Este decréscimo, no entanto, é menor que o observado em amostras de 123 dopadas com óxidos de metais $3d$ (1). Para pequenas concentrações de NiS é observado um aumento em T_c . Todas as amostras com NiS e FeS possuem estrutura ortorrômbica e não é observada a presença de outras fases nos difratogramas de raios X. Nas amostras com ZnS observa-se a presença de fases adicionais (2). O espectro de emissão de raios X confirma a presença de enxofre na rede 123 e revela que o estado de oxidação do enxofre é função da concentração do dopante e do tratamento térmico utilizado. Medidas de magnetização em função do campo magnético revelam um *crossover* entre as linhas FC e ZFC.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

(1) R. Liang et al. *Physica C* **170**, 307-314 (1990)

(2) Agradecemos R. Jardim e P. Suzuki pela realização destas medidas.

SOBRE A CINÉTICA DE FORMAÇÃO DOS COMPOSTOS $Eu_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$, OBTIDOS ATRAVÉS DE PRECURSORES SOL-GEL

SUZUKI, P. A.; JARDIM, R. F.

IFUSP

GAMA, S.

IFGW - UNICAMP

Amostras policristalinas de $Eu_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0 \leq x \leq 0,18$) foram preparadas a partir de precursores sol-gel e sinterizadas em ar a temperaturas diferentes. Os resultados de difração de raios-X mostram que os

precursores como crescidos apresentam baixa cristalinidade. A formação das fases de $Eu_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ocorre a partir de $500^\circ C$, como observado através do aparecimento de largas reflexões de Bragg correspondentes à fase desejada. A $700^\circ C$, $Eu_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ coexiste com Eu_2O_3 , CeO_2 e CuO . Amostras monofásicas foram obtidas a partir das sinterizações adicionais a $950^\circ C$, em ar, por 20h. A efetiva substituição de Eu por Ce na fase Eu_2CuO_4 foi confirmada através do decréscimo do parâmetro de rede c com o aumento de x e o limite de solubilidade foi encontrado para $x > 0,15$. Os resultados de análise térmica revelam temperaturas eutéticas da ordem de $T_e \cong 1020^\circ C$, que são quase independentes da concentração de Ce. Por outro lado, a temperatura peritética T_p aumenta significativamente com a crescente concentração de Ce. Os valores encontrados para T_p foram: $T_p \cong 1180^\circ C$ para Eu_2CuO_4 e $T_p \cong 1195^\circ C$ para $Eu_{1,85}Ce_{0,15}CuO_{4-y}$. Análises termogravimétricas obtidas durante o processo de aquecimento das amostras estudadas mostram uma perda de massa da ordem de 1,5%, na temperatura peritética. Esta perda de massa foi atribuída à remoção de oxigênio, que é parcialmente recuperada durante o processo de resfriamento. (Suporte financeiro: FAPESP e RHAE/CNPq)

RESISTIVITY OF $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ UP TO 1000K: AN ESTIMATION OF THE ELECTRON-PHONON COUPLING CONSTANT

KOPELEVICH, Y.; MOEHLECKE, S.; TORRES, J. H.
S.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

We report first measurements of the resistivity as a function of temperature $\rho(T)$ up to $\sim 1000K$ in $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ high- T_c superconductor. The resistivity was found to be essentially linear in the temperature region slightly above $T_c \cong 110K$ and up to $\sim 650K$. At higher temperatures an upturn of $\rho(T)$ was observed. DTA and TGA analyses, at the same heating rate of 3.5 K/min as the resistivity measurements, show no phase decomposition in the measured temperature range. From the resistivity slope $\partial\rho/\partial T \cong 8\mu\Omega cm/K$ and using penetration depth data [1] we could determine the plasma energy $\hbar\omega_p = 1.59$ eV as well as the effective strength of the electron-phonon coupling $\lambda_{eff} \cong 5$, which is related to the McMillan coupling constant, without any free parameter. With this value of λ_{eff} the mean free path l at $T=650K$ was found to be $\leq 1\text{\AA}$. The absence of saturation in $\rho(T)$ imposes an inequality $\lambda_{e-ph} \ll \lambda_{eff}$, where λ_{e-ph} is the electron-phonon interaction constant. An upper limit for λ_{e-ph} will be discussed and a comparison with others HTS's is given as well. We also discuss the upturn of $\rho(T)$ at $T > 650K$.

[1] Y.Kopelevich, S.Moehlecke, and J.H.S.Torres, Phys.Rev.B49, 1495 (1994).

This work was partially supported by FAPESP (proc. 91/0573-0 and 92/3293-4).

Teoria: Modelos Fenomenológicos e Microscópicos (SUC) – 08/06/94

COMPORTAMENTO DA MAGNETIZAÇÃO EM SUPERCONDUTORES UNIAXIAIS NO LIMITE DE INDUÇÃO MAGNÉTICA ELEVADA.

OLIVEIRA, I. G. DE

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Utilizando a teoria de London anisotrópica obtemos uma expressão geral para a energia do sistema de vórtices considerando a energia de interação e a auto-energia da linha. Em geral considera-se as direções dos vetores \vec{B} e de \vec{H} como sendo a mesma, uma vez que estas diferem em uma quantidade proporcional ao inverso de κ . Nos supercondutores de altas temperaturas em geral a constante κ tem um valor da ordem de 100. Neste trabalho consideramos valores de κ não tão elevados e obtemos a correção para o ângulo entre as direções da indução magnética e do campo magnético externo aplicado em supercondutores de anisotropia uniaxial. Deste modo foi possível fazermos um estudo da magnetização nestes materiais considerando o campo magnético externo sendo obtido simplesmente da relação $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}$. Consideramos a situação em que o campo magnético externo não está alinhado com o eixo de simetria do material formando um ângulo α e a indução magnética formando um ângulo θ . Esta relação entre α e θ nos possibilitará um estudo mais elaborado da possível coexistência de orientações de linhas de vórtices, permitindo uma análise teórica das figuras de decoração magnéticas encontradas recentemente por C.A.Bolle e outros.

LAYERED STRUCTURE EFFECTS ON THREE-DIMENSIONAL SUPERCONDUCTORS

DORIA, M. M.

PUC-Rio

I consider the Lawrence-Doniach theory in the limit where the physical phenomena are expected to occur at length scales much larger than the inter-layer separation and find non-linear corrections to the anisotropic Ginzburg-Landau theory which give important contribution in the high-angle region. This is when the macroscopic supercurrents circulating around the vortices are influenced the most by the layered structure.

The non-linear contribution of the Josephson current to the torque peak in highly anisotropic superconductors is understood here in terms of a mass anisotropy ratio which depends on the angle and on the magnetic induction. For highly anisotropic superconductors, the present continuum limit of the Lawrence-Doniach theory should provide a more accurate determination of the mass anisotropy ratio from torque experiments than that obtained from V. Kogan's formula.

GAP DE SPIN E SUPERCONDUTIVIDADE NO MODELO DE HUBBARD

SANTOS, R. R. DOS

Departamento de Física, PUC/Rio e Instituto de Física, UFF

O estado normal dos materiais supercondutores à base de CuO_2 apresenta características surpreendentes, tais como a presença de um *gap* nas excitações de spin, que se abre a uma temperatura $T^* > T_c$, e uma dependência não-convencional da resistividade com a temperatura, para algumas dopagens. Em busca de uma descrição simplificada do que ocorre na fase normal destes materiais, neste trabalho investigamos o diagrama de fases para o modelo de Hubbard atrativo, incluindo a dependência de T^* com U . Analisamos também o *gap* de spin numa bicamada de férmions com interações repulsivas, através da suscetibilidade magnética; a tendência de emparelhamento, avaliada pelas suscetibilidades supercondutoras, também é discutida.

TÉCNICAS DIAGRAMÁTICAS PARA O ESTUDO DE SISTEMAS FORTEMENTE CORRELACIONADOS

NOGUEIRA, F. DE S.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas -CBPF

ANDA, E. V.

Departamento de Física da Universidade Federal Fluminense - Niterói -RJ

A descoberta dos supercondutores de alta temperatura crítica incentivou significativamente o estudo dos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados. Do ponto de vista teórico várias técnicas da teoria de campos e do problema de muitos corpos foram reformuladas para o estudo específico dos Hamiltonianos de Hubbard, Anderson e de Emery. Em particular, a técnica dos bósons escravos proposta no contexto da integral funcional teve bastante sucesso para estudar alguns aspectos da transição metal-isolante, das propriedades magnéticas e supercondutoras destes modelos. Nesse trabalho, propomos uma formulação diagramática para o cálculo das funções de Green e termodinâmicas de um sistema descrito pelo Hamiltoniano de Hubbard. Dado

o caráter bilinear da interação Coulombiana no formalismo dos bósons escravos é possível a utilização do teorema de Wick tomando esta interação como Hamiltoniano não-perturbado. Calculamos sistematicamente as funções de Green conectadas diagonais no sítio (cumulantes), como também os propagadores dos bósons auxiliares numa formulação ortodoxa da diagramática de Feynman. O método proposto permite resolver vários problemas técnicos de trabalhos anteriores. Propomos diversas aproximações para a expansão diagramática e discutimos as suas consequências nas propriedades físicas do sistema.

THE ELECTRONIC STRUCTURE OF SUPERCONDUCTING K_3C_{60}

MOTA, R.

Depto. de Física - Univ. Fed. Sta. Maria - RS

COUTINHO, K.; CANUTO, S.; FAZZIO, A.

Instituto de Física - USP - SP

Among several interesting new problems that emerged after the discovery of the C_{60} molecule one of the most interesting was the observation of superconductivity in K_3C_{60} with a transition temperature of 19.3°K. In this contribution we analyze the electronic structure of several potassium-doped C_{60} , in different stoichiometries, from INDO-CI calculations. We are particularly interested in contributing to the understanding of the change in the density state when the C_{60} is K-doped. It is known, for instance, that whereas K_3C_{60} is a metal with a distinct Fermi-level cutoff, K_4C_{60} is a semiconductor wrongly predicted by band calculations to have metallic character.

Analysis of our calculated density-of-states for different clusters, in special, $K_8(C_{60})_3$ and $K_{16}(C_{60})_3$ give interesting suggestions towards an explanation for the superconductivity. We find that $K_8(C_{60})_3$ has a maximum density-of-state at the Fermi level in agreement with the experimental findings for K_3C_{60} .

On the formation of $LnCeO_y$ ($Ln = Nd, Pr, Sm, Eu$) solid solutions

JARDIM, R. F.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

MAPLE, M. B.

Department of Physics, University of California, San

Diego, USA

Solid solutions of polycrystalline samples of $LnCeO_y$ ($Ln = Nd, Pr, Sm, Eu$) sintered at temperatures up to 1400°C were studied by high-resolution x-ray diffractometry. The CeO_2 fluorite-type structure is retained for all substitutions up to 50 at.% of Ln. The width of the solid solutions increases with increasing sintering temperature for all Ln substitutions up to 1400°C. While the lattice parameter a decreases slightly for Pr, which is consistent with the presence of Pr^{+4} , an increase of

a for Ln = Nd, Sm, and Eu substitutions was observed, in agreement with Ln^{+3} substitution. Polycrystalline samples of $Ln_{1.85}Ce_{0.15}CuO_{4-y}$, which contain a significant amount of these solid solutions, are believed to have an appreciable cation nonstoichiometry. (Work Supported by the DOE (USA) and FAPESP)

Supercondutividade I (SUC) - 08/06/94

TRANSIÇÕES de FASES NO DIAGRAMA $H - T$ DE FILMES FINOS SUPERCONDUTORES

D'ALMEIDA, F. M. R.; DORIA, M. M.

PUC-Rio

Dentro do contexto da teoria de Ginzburg-Landau estuda-se um filme fino sujeito a um campo magnético externo paralelo às suas superfícies. A teoria formulada na rede e resolvida através do método de Recozimento Simulado, pode descrever tanto um meio contínuo como um conjunto de grãos sem estrutura interna, de acordo com a escolha dos valores dos parâmetros. Estuda-se o comportamento do filme em duas transições de fases em relação ao campo magnético aplicado. A primeira corresponde ao campo crítico inferior, H_{c1} , e a segunda a uma transição de dimensionalidade da rede de vórtices, que ocorre dentro do estado misto num campo crítico H_{12} . Abaixo de H_{12} os vórtices encontram-se regularmente espaçados numa única coluna localizada no plano médio do filme. Acima de H_{12} os vórtices formam uma rede bidimensional feita de duas colunas paralelas, uma deslocada em relação a outra por meia distância de separação entre vórtices consecutivos de uma mesma coluna. A magnetização reversível do filme é aqui determinada desde a fase Meissner até acima do campo H_{12} . Finalmente, nossos resultados sobre as duas transições são comparados com aqueles obtidos por S. Takács no contexto da teoria de London.

ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS INTER E INTRAGRANULARES DE UMA AMOSTRA MTG DE $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ EM FUNÇÃO DO CAMPO EXTERNO

MOREIRA, F. A. M.; CARVALHO JR, J. S. DE;

ORTIZ, W. A.; LIMA, O. F. DE

Depto. de Física, Univ. Federal de São Carlos, C.P. 676,
135565-905, São Carlos, S.P.

Usando suscetometria AC de alta sensibilidade obtivemos curvas da suscetibilidade diferencial em função do campo aplicado (χ' vs. H) à temperatura de 77K,

nas quais as transições supercondutoras intergrãos e intragrãos são perfeitamente distinguíveis. Para campos DC pequenos ($0 \leq H \leq 520$ Oe) obtivemos curvas para diversos valores do campo excitador (h), desde 10mOe até 5Oe, à frequência fixa de 37.4 Hz. As curvas χ' vs. H para a amostra MTG de YBaCuO exibem diferentes regiões características, que serão discutidas em detalhe. Nesta comunicação discutiremos também a dependência dos campos críticos H_{c1} intergrão e intragrão com (h), bem como os resultados para a distribuição de correntes críticas intergrãos com base em um modelo de meio efetivo. parcialmente financiado por CNPq, FAPESP e CAPES

SÍNTESE DE CERÂMICA SUPERCONDUTORA PELO PROCESSO DE SECAGEM COM FLUÍDO SUPERCRÍTICO.

CARVALHO, C. L.

UNESP - Ilha Solteira

FLORENTINO, A. DE O.; AEGERTER, M. A.

IFQSC - USP - São Carlos

SANTOS, D. I. DOS; RUBO, E. A. A.

UNESP - Bauru

Neste trabalho, preparou-se pós cerâmicos por via úmida a partir de uma mistura de nitratos com posterior secagem em condição supercrítica (CO_2) com o objetivo de obter o sistema $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_x$ (BSCCO). A caracterização elétrica e estrutural das pastilhas obtidas a partir do pó foram feitas usando as técnicas de resistência elétrica (método das quatro pontas), densidade de corrente, microscopia eletrônica de varredura, análise de energia dispersiva e difração de raios-X. Os resultados estão comparados com os obtidos para as amostras preparadas por coprecipitação de oxalatos. O método de preparação influe na estrutura e na temperatura crítica de condução. O tempo requerido para a calcinação do material foi reduzido drasticamente. As medidas de densidade de corrente elétrica mostraram que os valores entre os dois métodos são comparáveis ($50 A/cm^2$ à 5K).

ESTUDO DO COMPORTAMENTO DIAMAGNÉTICO PERTO DA TRANSIÇÃO SUPERCONDUTORA EM FOLHAS DE TÂNTALO COM ALTA RELAÇÃO SUPERFÍCIE/VOLUME

AVILA, M. DE A.; LIMA, O. F. DE

Instituto de Física - UNICAMP

O Tântalo puro é um supercondutor convencional com temperatura crítica T_C em torno de 4,4 K. Inicialmente considerado como material tipo II, com a melhoria no processo de produção no início da década de 60 foi possível obter amostras com κ tão baixo quanto 0,42, caracterizando-o como tipo I. Curvas de Magnetização versus Temperatura ($M \times T$) e Campo

Aplicado ($M \times H$) foram obtidas com magnetômetro SQUID em folhas quadradas de Tântalo puro (2x2mm) com espessura de 0,025mm. As medidas foram feitas com a superfície das amostras nas posições paralela e perpendicular com relação ao campo aplicado H . Os resultados mostram uma significativa diferença no comportamento diamagnético das amostras entre estas duas disposições, havendo arredondamento no início da transição supercondutora para a disposição paralela e ausência completa deste arredondamento na disposição perpendicular. Nesta comunicação apresentaremos nossos principais resultados juntamente com uma análise das possíveis causas destas diferenças, como a manifestação da Supercondutividade Superficial e a influência do fator de desmagnetização. Agradecemos o apoio financeiro da FAPESP e CNPq.

ESTUDOS MÖSSBAUER DE DEFEITOS ESTRUTURAIS INDUZIDOS POR DOPAGEM NO SISTEMA $^{57}Fe : La_{2-x}M_xCuO_4$ (M=Ca,Sr,Ba)

BAGGIO-SAITOVITCH, E.; SCORZELLI, R. B.;

AZEVEDO, I.

CBPF

DIAZ, C.

Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Facultad de Física, Univ. de La Habana, Cuba.

GARCIA, S.

Laboratorio de supercondutividad, Facultad de Física, Univ. de La Habana, Cuba.

O estudo de defeitos estruturais no sistema $La_{2-x}M_xCuO_4$ (M=Ca,Sr,Ba) é de particular interesse na compreensão da relação entre as modificações nas vizinhanças locais e as propriedades supercondutoras. São relevantes principalmente, as vacâncias de oxigênio e as inclusões intersticiais. Neste trabalho apresentamos um estudo Mössbauer à temperatura ambiente deste sistema onde o conteúdo x de M cobre uma larga faixa de concentração ($x \leq 0,40$ para Sr e Ba e $x \leq 0,30$ para Ca) usando o núcleo de ^{57}Fe como sonda local (1 at.% de ^{57}Fe em Cu). Considerando as diferenças de raios iônicos de M^{2+} e o equilíbrio entre os dois tipos de defeitos mencionados, apresentamos uma análise que tenta explicar as diferentes componentes do espectro e sua correlação com aspectos gerais reportados na literatura. Os subspectros Mössbauer foram atribuídos a três posições na rede afetadas diretamente por defeitos locais, cujas populações relativas mostram uma dependência em x .

**ESTUDO DE UMA TÉCNICA DE
OBTENÇÃO E SINTERIZAÇÃO DA
CERÂMICA SUPERCONDUTORA DE
ALTA TEMPERATURA CRÍTICA DO
SISTEMA BiSrCaCuO**

RUBO, E. A. A.; SANTOS, D. I. DOS

Depto. Física-UNESP-Bauru

CARVALHO, C. L.

Depto. Ciências-UNESP-Ilha Solteira

AEGERTER, M. A.

Depto. Física e Ciências Materiais-USP-São Carlos

Amostras cerâmicas supercondutoras de alta temperatura crítica (80 e 110K) do sistema BiSrCaCuO foram preparadas a partir de dois processos: mistura de óxidos e coprecipitação de oxalatos. O pó precursor obtido foi caracterizado pelas técnicas de sedigrafia, ATD/ATG, MEV e difração de raios X e sua estequiometria determinada por ICP do líquido filtrado. O pó previamente calcinado à 790°C/16h (3 ciclos), foi conformado através de prensagem uniaxial. Os corpos cerâmicos foram sinterizados a 840°C por 100 ou 20h, com e sem a aplicação simultânea de corrente elétrica ($100 \leq I \leq 200$ mA) através de fios de prata prensados simultaneamente com a amostra. As amostras sinterizadas foram caracterizadas por Mev e difração de raios X e a resistividade elétrica medida pela técnica das quatro pontas. Ao se determinar a temperatura crítica, através da medida de resistividade elétrica, observa-se que a principal fase presente é a 2212 de $T_c = 80$ K, para amostras tratadas com e sem aplicação de corrente elétrica durante a sinterização. Esse resultado é confirmado pelas análises de difração de raios X. Ao que parece a aplicação de um campo elétrico ou magnético, nas proporções e formas em que foram utilizados, não produziram alterações nas amostras do ponto de vista das propriedades finais analisadas.

**ESTUDOS MÖSSBAUER DE DESSORÇÃO
DE OXIGÊNIO NO SISTEMA**

$Gd_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$

CANDELA, D. S.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Detalhes estruturais ligados à configuração local de oxigênio e à presença de vacâncias tem um papel determinante no comportamento de cupratos supercondutores. Entre os cupratos tipo R_2CuO_4 (R=terras raras), aqueles que apresentam a fase- T' (coordenação planar de oxigênio), são particularmente interessantes uma vez que os supercondutores tipo "n" ($Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$) cristalizam com esta estrutura. Além disso o estabelecimento do estado supercondutor nestes sistemas depende de detalhes de preparação, provavelmente ligados à concentração de vacâncias de oxigênio. Neste trabalho concentramos nosso interesse no sistema $Gd_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ que apresenta uma estrutura

isomorfa ao $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$, porém é um isolante. Substituímos de 1 a 3 % de átomos de cobre por ^{57}Fe para estudar através de espectroscopia Mössbauer tanto as configurações locais de oxigênio como suas modificações no processo de desorção de oxigênio. Este processo é realizado em vácuo para temperaturas até 280°C, uma vez que acima deste valor ocorre uma decomposição do material.

**STRUCTURAL, TRANSPORT AND
MAGNETIC STUDIES OF THE NEW
INTERMETALLIC QUATERNARY
(R-M-B-C, R=RARE EARTH OR Y,
M=Ni,Pd,Pt) SYSTEMS**

GIORDANENGO, B.; ELMASSALAMI, M.; BUD'KO, S.
L.; MONDRAGON, J. C.

CBPF

FONTES, M. B.

CBPF/UFF

SAITOVITCH, E. B.

CBPF

The new family of quaternary systems R-M-B-C (R=rare earth or Y; M = Ni, Pd, Pt) are promising superconducting candidates, even though their current highest T_c is around 23K. In this work a set of samples with the different initial composition was prepared by arc-melting in pure argon atmosphere and an attempt was made to study their stoichiometric properties, structural stability, transport and magnetic properties using XRD, thermal and elemental analysis, ac susceptibility, magnetization and resistivity techniques. Studies are also carried out in search for new isomorphs where M is partially or completely being substituted by other transition-metal ion such as Fe.

**DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO
DE OXIGÊNIO EM SUPERCONDUTORES
POR COMPLEXOMETRIA COM EDTA**

AGUIAR, J. A.; FERREIRA, J. M.; BARBOSA, M. V.

Departamento de Física - UFPE

PAVÃO, A. C.; DINIZ, F. B.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

Neste trabalho descrevemos a utilização da técnica de complexometria com ligante multidentado (EDTA) para determinação da concentração de oxigênio em cerâmicas supercondutoras do tipo $YBa_2[(CuO)_{1-x}(AS)_x]_3O_{4-\delta}$ (para $A = Ni, Fe$ e Zn). Esta técnica consiste de titulações de complexidade com EDTA em meio básico na presença de indicadores seletivos de íons metálicos em atmosfera inerte. Este método apresenta uma grande vantagem em relação ao método por titulação iodométrica usual, pois além de permitir a determinação do estado de oxidação médio do cobre, permite também determinar o estado de oxidação de seus substituintes ($A = Ni,$

Fe, e Zn) e, através destes, o teor de oxigênio e o peso molecular real da amostra.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

ESTUDO DO DIAGRAMA DE FASE H-T EM FILMES FINOS DE Nb

ROLIM, A. L. V. S.; FERREIRA, J. M.; AGUIAR, J. A.

Departamento de Física - UFPE

O estudo do diagrama de fase campo magnético - temperatura em materiais supercondutores é de grande importância para o entendimento da dinâmica de vórtices. Recentemente, Matthew F. Schmidt et al. (1) mostraram que a linha de irreversibilidade no diagrama H-T de filmes finos de Nb com 500nm pode ser explicada segundo o modelo de fusão das linhas de vórtices. Neste trabalho estudamos o diagrama H-T de filmes finos de Nb com espessuras entre 100 e 1000nm. Os filmes foram depositados em substratos dielétricos (vidros) e semicondutores (silício) através da técnica de deposição por magnetron sputtering DC e RF. O efeito da pressão de Ar (10^{-1} - 10^{-3} mbar), potência das fontes DC e RF (0-500W) e separação alvo-substrato na qualidade dos filmes são analisados.

(1) Matthew F. Schmidt et al. Phys. Rev. Lett. **70**, 14 (1993).

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

ESTUDO DA MENOR DIMENSIONALIDADE CRÍTICA NAS FASES MEISSNER E MISTA DE SUPERCONDUTORES TIPO II

ROJAS, J. R.; NAZARENO, H. N.

CIFMC-UnB

Baseados na Teoria de Campo Médio, muitos autores têm desenvolvido diversas teorias com o objeto de identificar as diferentes fases presentes nos novos materiais supercondutores a alta temperatura. Uma questão importante que deve-se considerar para esse fim, é o efeito das flutuações térmicas sobre a coerência de fase. Um estudo, igualmente baseado na Teoria de Ginzburg-Landau, mostra que as flutuações térmicas destroem a coerência de fase para uma dimensionalidade menor que dois na fase Meissner, menor que quatro na fase convencional flux-lattice de Abrikosov, e menor que três no limite de razão de Ginzburg finita. Para chegar a essa conclusão, precisamos fazer uma mudança no gauge da fase do parâmetro de ordem, o que permite uma definição adequada do grande rango de ordem de coerência de fase, em termos da diferença de fase entre dois pontos r e r' , tal que, quando esta diferença de fase vai a infinito, a coerência de fase desaparece. O resultado para a fase Meissner segue-se diretamente do raciocínio anterior. Na flux lattice, a destruição da coerência de fase deve-se a mudanças na fase, induzidas por movimen-

tos de corte das linhas de fluxo; então, é preciso fazer uso da teoria de elasticidade, definindo a coerência de fase em termos dos módulos de inclinação das linhas de fluxo e de corte da flux lattice.

Transport and magnetic properties of polycrystalline $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$

JARDIM, R. F.; WESTPHAL, C. H.; COHENCA, C. H.
I.F.U.S.P.

BEN-DOR, L.

Hebrew University, Jerusalem

MAPLE, M. B.

University of California, San Diego

A systematic study of transport and magnetic properties of polycrystalline $Sm_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ ($0.15 \leq x \leq 0.18$) specimens obtained from a sol-gel precursor reveals a striking double resistive superconducting transition. One of the resistive transitions takes place at a temperature T_{ci} and is almost insensitive to Ce concentration, applied magnetic field, and current density, while the other transition occurs at a lower temperature T_{cj} and is very sensitive to Ce content, applied magnetic field, and current density. Alternating-current magnetic susceptibility χ_{ac} measurements reveal two interesting features. There is only one contribution to the diamagnetic signal below $\sim 20K$, which is particularly evident in the resistive component χ'' of χ_{ac} where a peak at T_{cj} can be identified. The application of an applied magnetic field shifts the χ'' peak to lower temperatures and reveals a spin-glass-like behavior. All the results can be satisfactorily explained in terms of weakly linked Josephson junctions between small superconducting islands. The small islands have a superconducting transition at a higher temperature T_{ci} , and the long-range phase coherence is achieved through Josephson coupling at lower temperatures T_{cj} . All the results suggest a superconducting glass state in a disordered Josephson network.

PREPARAÇÃO DE COMPÓSITOS SUPERCONDUTOR-METAL

FERREIRA, J. M.; AGUIAR, J. A.; GAMEIRO, C. C.;
BARBOSA, M. V.

Departamento de Física - UFPE

PAVÃO, A. C.

Departamento de Química Fundamental - UFPE

Amostras cerâmicas de composição $H_0Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ são preparadas por reação sólida dos óxidos constituintes. Grãos micrométricos obtidos pela pulverização dessas amostras são revestidos por uma fina película de prata depositada por processo químico com a utilização de soluções de $AgNO_3$. Os compósitos assim obtidos foram submetidos a tratamento térmico em uma atmosfera rica em oxigênio à temperatura de $450^\circ C$ -

650°C, a fim de recuperar suas propriedades supercondutoras. Posteriormente foram compactados e sinterizados a baixas temperaturas em atmosfera de oxigênio. As amostras assim obtidas, compósitos supercondutor-metal, apresentam propriedades metálicas que aumentam a maleabilidade do material cerâmico e introduz a propriedade de fusão metálica, possibilitando a soldagem do material. Estudos anteriores (1) mostraram que a intensidade da corrente crítica nesses compósitos supercondutores é aproximadamente o dobro da obtida no óxido cerâmico sem o metal. Acreditamos que essa intensidade possa ser aumentada ainda mais se, no processo de sinterização da amostra, os grãos já estiverem alinhados por um campo magnético. Pretendemos produzir amostras desse compósito orientadas magneticamente e estudar a dependência da densidade de corrente crítica, em função da temperatura e do campo magnético aplicado. Nessa comunicação apresentaremos o processo de produção utilizado e discutiremos os resultados das medidas de caracterização elétrica das amostras já obtidas.

(1) S. Reich and I. Felner, J. Appl. Phys. **67**, 388 (1990).

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

SUPERCONDUTIVIDADE EM TEORIAS DE GAUGE GENERALIZADAS

DORIA, R. M.

UNIVERSIDADE CATOLICA DE PETROPOLIS

Uma proposta de modelo para Supercondutividade começa a ser estudada através das chamadas Teorias de Gauge Generalizadas. Analisando o caso Abeliano observa-se que fons auto-interagentes e campos vetoriais massivos são obtidos sem violar a invariância de gauge. Demonstra-se através de BRS que o modelo é renormalizável a todas as ordens. A unitariedade está sendo estudada a cada ordem perturbativa.

A primeira vantagem deste modelo é o de poder estudar a supercondutividade sem requerer o mecanismo da quebra espontânea da simetria. Duas qualidades o colocam na rota da supercondutividade: uma possibilidade microscópica para se compreender os pares de Cooper e a existência de um efeito Meissner. A existência de fons auto-interagidos resulta em força de atração entre os elétrons que pode sobrepor a Coulombiana. O comprimento de penetração do campo magnético dependerá das massas das partículas vetoriais envolvidas assim como dos vértices trilineares e quadrilineares dos fons.

Evidentemente espera-se que o fenômeno de supercondutividade não seja tratado como um efeito de partículas. Então, observamos a vantagem que tais Teorias Generalizadas de conter em seu corpo a noção de um contexto coletivo.

Supercondutividade II (SUC) - 09/06/94

EFFECTIVE PINNING FORCE AND PINNING BARRIER FOR A FULLERENE SUPERCONDUCTOR

BUNTAR, V.

CIFMC, UnB

From the experimentally obtained $H(T)$ dependence of the transition boundary between short-range (or vortex glass) and long-range (or distorted vortex lattice) vortex order for Rb_3C_{60} superconductor the temperature dependence of the effective potential barrier ($U_{eff} = U_{pin} - kT$, where U_{pin} is a pinning barrier of a potential well) for pinning of a single vortex on a pinning center and the effective pinning force, f_{eff} were calculated. It was shown that the effective barrier U_{eff} falls almost linearly with increasing of temperature. From the experimental values of a critical external magnetic field on a transition boundary, \tilde{H} , at different temperatures and temperature dependence of a penetration depth from a two-fluid model approximation, which gives good agreement with experimental results, one can calculate values of the repulsive intervortex force on the transition boundary which leads to escape of the pinned vortex from the potential well. It was shown that harmonic thermal fluctuations strongly decrease the effective pinning force.

ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS INTER E INTRAGRANULARES DE UMA AMOSTRA MTG DE $YBa_2Cu_3O_{7-\gamma}$ EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA

CARVALHO JR, J. S. DE; MOREIRA, F. M. A.; ORTIZ, W. A.; LIMA, O. F. DE

Depto. de Física, Univ. Federal de São Carlos, C.P. 676, 13565-905, São Carlos S.P.

Usando suscetometria AC de alta sensibilidade obtivemos curvas da suscetibilidade diferencial em função da temperatura (χ' vs. T) para campos DC fixos ($0 \leq H \leq 520 Oe$), que permitem distinguir as transições supercondutoras intergrãos e intragrãos. Para temperaturas no entorno de T_c , obtivemos curvas para diversos valores do campo excitador (h), desde 10mOe até 5Oe, à frequência fixa de 37.4 Hz. As curvas (χ' vs. T) para a amostra MTG de $YBaCuO$ exibem diferentes regiões características, que serão discutidas em detalhe. Nesta comunicação discutiremos também a dependência da temperatura crítica com H e h . Parcialmente financiado por CNPq, FAPESP e CAPES

**CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA E
ESTRUTURAL DE CERÂMICAS
SUPERCONDUTORAS BSCCO
PREPARADAS COM CONTROLE
GRANULOMÉTRICO DOS PÓS
PRECURSORES.**

CARVALHO, C. L.
UNESP - Ilha Solteira
SANTOS, D. I. DOS; RUBO, E. A. A.
UNESP - Bauru
AEGERTER, M. A.
IFQSC - USP - São Carlos

Apresentamos resultados do controle granulométrico do pó usado na fabricação de pastilhas supercondutoras de alta temperatura crítica T_c . O pó é obtido pelo método de coprecipitação de oxalatos dos elementos que constituem o sistema Bi:Sr:Ca:Cu:O, segundo a composição nominal (2:2:2:3) e, após vários estágios de calcinação, os grãos de tamanho 40-120 μm são submetidos a uma separação de tamanho por peneiração. A caracterização elétrica e estrutural das pastilhas, foi feita usando a técnica de resistividade elétrica (método das quatro pontas DC), densidade de corrente, microscopia eletrônica de varredura, análise de energia dispersiva e difração de raios-X. As pastilhas feitas com grãos de dimensão média de 40 μm apresentaram temperatura crítica $T_c \cong 110\text{K}$, compatível com a fase (2:2:2:3) e, densidade de corrente elétrica da ordem de 50 A/cm² à 5K.

ORDEM LOCAL NOS COMPOSTOS

$(La_{1-x}Gd_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ DOPADOS COM Fe

CANDELA, D. S.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.;
ELMASSALAMI, M.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

LITTERST, F. J.

Institut für M. und N. Festkörperphysik. T.U.
Braunschweig-Germany

Nos cupratos lamelares os detalhes estruturais, tais como o conteúdo ou configuração local de oxigênio, são considerados determinantes para suas propriedades macroscópicas. Neste trabalho estudamos a influência da geometria local sobre o tipo de ordem magnética observados na série $(La_{1-x}Gd_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$. Esta série é apropriada para estes estudos visto que variando a concentração de Gd nós passamos através de três coordenações locais de oxigênio: octaédrica ($-T$), para piramidal ($-T^*$) e finalmente para planar (fase- T'); estas estruturas são comuns para diferentes óxidos supercondutores e aqui elas são formadas na mesma série de compostos. Substituímos de 1 a 3 % de átomos de Cu por ⁵⁷Fe para investigar, por espectroscopia Mössbauer, a presença de ordem magnética local. Apesar das perturbações locais induzidas pelos substituintes de Fe o campo magnético hiperfino observado tem valores típicos para as três fases.

**STUDIES OF THE INFLUENCE OF THE
OXYGEN CONTENT AND DOPING ON
THE TRANSPORT AND MAGNETIC
PROPERTIES OF THE 2-1-4 CERAMIC
SUPERCONDUCTORS.**

ELMASSALAMI, M.; BUD'KO, S. L.

CBPF

GARCIA, S.

Univesidade de Havana, Cuba.

GIORDANENGO, B.

CBPF

CONTINENTINO, M. A.

UFF

SAITOVITCH, E. B.

CBPF

The influence of the oxygen content or substitutional doping concentration of Eu (up to 10%) or else Fe (up to 3%) on the transport and magnetic properties of the $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_{4-\delta}$ ceramic oxide was studied. The Eu (Fe) dopant is preferentially substituting the La (Cu) site. As expected, a fractional change of oxygen or dopant concentration was found to push down the T_c , decrease the superconducting fraction and as well introduce and a localization process at low-T. This localization is found to be drastically influenced by the Eu or O concentration and was found possible to be described as a variable range hopping process. However, at sufficiently high temperature, the metallic character as reflected by the dR/dT was found not be influenced. Discussion is given concerning the possible origin of the localization process.

**ANOMALOUS MAGNETIC RELAXATION
IN HIGH- T_c SUPERCONDUCTORS OVER
THE REVERSIBLE RANGE OF THE B-T
PLANE.**

KOPELEVICH, Y.; MOEHLECKE, S.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

Zero-field-cooled magnetic relaxation measurements show a strong nonlogarithmic increase of the absolute value of the magnetization with time and is followed by a saturation, in a very broad region of the B-T phase diagram. This anomalous magnetic relaxation toward diamagnetism was observed to start at the "irreversibility line" at high magnetic fields where fluctuations of the flux-line-lattice (FLL) are of 2D nature and appears below this line in the low-field limit or the 3D FLL regime, and extending up to T_c . This new phenomenon was studied in details in bulk and powdered samples of $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$, but it was also observed to occur in bulk and single crystals ($H \perp ab$) of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$, and is similar to what was recently reported [1] in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals close to T_c ($H \perp c$). The origin of this intriguing intrinsic bulk

property of the high- T_c superconductors will be discussed. These results for $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ allow us to construct a B-T phase diagram displaying regimes of a "conventional" and "anomalous" magnetic relaxation. [1] M. Wolf and W. Gey, Phys. Rev. B48, 6707 (1993). This work was partially supported by FAPESP (proc. 91/0573-0 and 92/3292-4).

ELECTRICAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Pr_xCu_2O_8$ HIGH- T_c SUPERCONDUCTOR AS A FUNCTION OF Pr^{3+} CONTENT.

LEITE, E.; TORIKACHVILI, M. S.

Dept. of Physics, SDSU

SANTOS, C. A. M.

Faculdade de Engenharia Química de Lorena

MOEHLECKE, S.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

BORGES, H. A.

Departamento de Física - PUC/RIO

Normal state electrical transport and flux line lattice (FLL) pinning properties were studied in $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Pr_xCu_2O_8$ bulk samples as a function of Pr^{3+} content in the range of $0 \leq x \leq 1$. The $T_c(x)$ dependence was determined: superconducting transition temperature T_c was found to be a nonmonotonic function of x with the maximum occurring around $x \approx 0.2$. A metal-insulator transition (MIT) induced by Pr^{3+} doping, which is probably of the Anderson type, is studied as well. The remarkable result is that the maximum in $T_c(x)$ and MIT occur at the same critical concentration of Pr^{3+} $x \approx 0.2$. In the mixed state, an "irreversibility line" (IL) related to the depinning of Abrikosov FLL was inferred from dc magnetization measurements $M(H,T)$ for $0 \leq x \leq 0.4$. The irreversibility temperature T_{irr} , shifts with x to the low-temperature region in a reduced temperature scale. We conclude that whatever the origin of IL, such a behavior of $T_{irr}(x)$ indicates a rise of anisotropy when Pr^{3+} content was increased. This work was partially supported by FAPESP (proc. 91/0573-0).

PERSISTENT PHOTOCONDUCTIVITY, HIGH PRESSURE AND OXYGEN CONTENT IN $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$: SEARCH FOR CORRELATION BETWEEN NORMAL STATE RESISTIVITY AND T_c .

BUD'KO, S. L.

CBPF

It has been well established that CuO_2 planes in high T_c cuprates (HTSC) are the most essential structural unit and the concentration of carriers in these planes is one of the most universal parameters which affects both normal and superconducting properties of the cuprates. There are several techniques by which a carrier concen-

tration in the CuO_2 planes may be changed: variation of oxygen content (chemical doping), charge transfer to the planes through application of hydrostatic pressure, carrier generation by photo-excitation (photodoping) and electric field induced carrier density modulation. Experimental data on changes of in-plane resistivity and T_c in oxygen deficient $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ caused by hydrostatic pressure, exposure to light, effect of electric field and change of oxygen content are discussed. In the first three cases a correlation between $\Delta\rho_{ab}$ and ΔT_c was observed. This correlation indicates that carrier density modulation is a main factor for the changes. Additional factors, for example, local oxygen ordering may effect the results in the case of changes in the oxygen content.

⊕ Work was completed in part in TCSUH, Houston, USA

TRANSIÇÃO CALORIMÉTRICA EM COMPÓSITOS SUPERCONDUTORES

ABREGO-CASTILLO, I.; GHIVELDER, L.

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Foram realizadas medidas de calor específico na faixa de 40 a 140 K em compósitos cerâmicos do tipo $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ -Ag, com 6, 11 e 23 wt% Ag. A partir destes resultados determinamos o salto de calor específico associado a transição supercondutora, $\Delta C(T_c)/T_c$, que decrece em função da quantidade de prata no compósito. Na amostra com 23%Ag nenhuma anomalia é observada na curva de calor específico devido ao alargamento da transição. No entanto a derivada do calor específico dC/dT mostra claramente a existência de uma anomalia na curva, que aparece como uma transição em dois estágios devido possivelmente a granulidade da amostra. Uma análise detalhada dos resultados mostra que a derivada do calor específico pode ser utilizada como uma importante ferramenta no estudo de amostras supercondutoras.

UMA EXTENSÃO DO MODELO GORTER-CASIMIR PARA A SUPERCONDUTIVIDADE

JURADO, S. G.; SILVA, P. R.

UFMG

Neste trabalho fizemos uma extensão da teoria Gorter-Casimir para a supercondutividade acrescentando à energia livre um termo não-linear da forma αy^2 , onde α é uma constante que em princípio pode tomar valores tanto positivos como negativos, conforme a interação não-linear seja do mesmo sinal ou compita com o termo linear em y . Calculamos para essa nova energia o parâmetro de ordem, o campo magnético crítico e o calor específico eletrônico e comparamos os nossos

resultados com os fornecidos pela teoria BCS e também com alguns resultados experimentais. Apresentamos também o que seria o diagrama de fase para um supercondutor com um ponto tricrítico. Os resultados obtidos a partir da nossa expressão para a energia livre apresentaram uma menor discrepância, com os resultados experimentais, que aquela apresentada pelos fornecidos pelo modelo G-C linear, o que nos leva a supor que a nossa expressão seja mais útil na comparação, pelo menos, com os resultados experimentais obtidos para os supercondutores do tipo I.

THERMAL EXPANSION STUDY OF YBaCuO SUPERCONDUCTORS IN THE INTERVAL 70-300 K : STRAIN AND COMPOSITION EFFECTS

MORGOON*, V. N.

USP, Instituto de Física, DFMT, São Paulo

NECHIPORENKO, I. N.; SIRENKO, V. A.

Institute for Low Temperature Physics, Kharkov, Ukraine

POPOV**, V. P.

Laboratory of Low Temperature Physics, Physical Department

The objective of presented work is investigation of thermal strain anomalies near 90 and 210 K in YBaCuO superconductor by simulation of the follows strained states of superconductor: homogeneously strained one; inhomogeneously strained one without external loads; stressed state. In a view of the experiment the first and second situations were produced by variations of oxygen content during preliminary heat treatment of the sample, the latter - directly in the process of low temperature measurements applying uniaxial loads. Strain measurements were performed in highly resolute dilatometers. The irreversible temperature run of lattice strains in the range of anomalies was observed. Description of observations on the basis of specially developed approach [1] connected with Landau phenomenological theory of phase transition is proposed, taking into account parameters of the strained state of the sample. The obtained results proved superconducting nature of anomaly at 90, it's relation to material anisotropy and close connection with structural anomaly at 210 K. The anomaly at 210 K may be explained by twins redistribution in the system due to local collective displacement of oxygen atoms. (V.N.Morgoon is thankful to FAPESP for financial support) I.Nechiporenko I.N.et al Cryogenics v.33,p.481,(1993).

* Also, Laboratory of Low Temperature Physics (LTP), Physical Department, State University, Kharkov, Ukraine

** State University

Properties of polycrystalline electron-doped superconductors

JARDIM, R. F.

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Several physical characterizations carried out on polycrystalline samples of electron-doped superconductors $Ln_{2-x}M_xCuO_{4-y}$ ($Ln = Nd, Pr, Sm, Eu; M = Ce, Th; 0.13 \leq x \leq 0.20$) have provided evidence for granularity and Josephson coupling in these compounds. While x-ray diffraction patterns habitually indicate single-phase polycrystalline samples, details of these measurements point out towards multiphase compounds comprised of, at least, two different crystallographic phases: one that is responsible for the superconducting properties and the other one, that is held to be a nonsuperconducting phase. From the electrical resistivity measurements, a striking double resistive superconducting transition is often observed and believed to be an intrinsic property of these polycrystalline samples. This feature has revealed a useful tool in separating contributions arising from a genuine superconducting phase and contributions arising from a disordered Josephson network. Magnetic susceptibility measurements also exhibit very interesting features as an insignificant diamagnetism at the superconducting transition and a spin-glass-like boundary line in the HxT phase diagram. All these interesting features are discussed within the framework of a granular superconductor model. (Work Supported by FAPESP and the DOE (USA))

MEDIDAS DE TENSÃO-DEFORMAÇÃO DE FIOS SUPERCONDUTORES EM BAIXAS TEMPERATURAS

SCHNEIDER, S.; RODRIGUES JUNIOR, D.

Faculdade de Engenharia Química de Lorena - FAENQUIL

/ Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR

POURRAHIMI, S.

Francis Bitter National Magnet Laboratory, MIT,

Cambridge, MA, USA

A caracterização de tensão-deformação de materiais a baixas temperaturas é de fundamental importância para o projeto e construção de magnetos supercondutores. Em particular, a caracterização dos fios supercondutores traz importantes informações sobre os limites de carga desses materiais. A caracterização de fios e cabos supercondutores de Nb_3Sn gera um conjunto de informações úteis para o desenho de magnetos e cabos, assim como na fabricação de juntas supercondutoras. Para esse projeto, o número máximo de

fios em um cabo será seis para facilitar o desenho do suporte de amostras e o tratamento térmico dos fios. No presente trabalho foi desenhado, construído e testado um suporte de amostra para a medida da curva de tensão-deformação de fios supercondutores em virtualmente qualquer temperatura. As medidas foram realizadas no Francis Bitter National Magnet Laboratory, MIT, utilizando-se um sistema Instron modelo 1350. O suporte de amostra foi acoplado em um atuador secundário que utiliza o mesmo sistema hidráulico que o atuador primário, mas tem um diâmetro total de 50 mm, o que possibilita utilizá-lo dentro de criostatos de medidas. A célula de carga, com capacidade máxima de 110 Kg, foi calibrada utilizando-se cargas com peso conhecido. O extensômetro foi calibrado, através da utilização de um micrômetro, em cada uma das temperaturas de medida. Serão apresentadas as medidas realizadas para fios comerciais de Nb₃Sn em 4,2 K (banho de hélio líquido), os cálculos dos módulos de elasticidade de cada um dos componentes nos compósitos (fios), a determinação do UTS das amostras, e possíveis utilizações do método para determinação da fração volumétrica de cada componente.

AValiação DA ESTABILIDADE TéRMICA DE UM MAGNETO SUPERCONDUTOR DE LABORATÓRIO DE 5T

SHIGUE, C. Y.; FIGUEIRA, D. S. S.

Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR/FAENQUIL

Com o intuito de se avaliar experimentalmente a estabilidade térmica de magnetos supercondutores de pequeno porte, foram realizados testes de "quench" em uma bobina supercondutora de NbTi, não-impregnada, de campo central (nominal) 5T e diâmetro interno de 75 mm. O "quench" foi induzido por elevação da corrente de transporte acima da corrente crítica na temperatura de operação de 4.2K. Os resultados obtidos com o treinamento do magneto foram os seguintes: campo central máximo 5.6T, corrente de "quench" de 155A, tensão elétrica máxima de 40V e temperatura máxima no interior do enrolamento de 140K após o "quench". O magneto exibiu degradação da corrente crítica devido à movimentação do condutor, fato verificado pelos picos observados nas curvas de tensão e temperatura do enrolamento, dentro do critério de margem de segurança da corrente crítica de 75% típica de magnetos não-impregnados.

MEDIDAS DE VELOCIDADE DE PROPAGAÇÃO DE ZONA NORMAL EM FIO SUPERCONDUTOR MULTIFILAMENTAR DE NbTi

SHIGUE, C. Y.; PINATTI, D. G.

Centro de Engenharia de Materiais - CEMAR/FAENQUIL

Medidas de velocidade de propagação de zona normal são comumente utilizadas na avaliação de estabilidade de magnetos supercondutores, por meio de uma simples medida de voltagem multiponto numa amostra curta (50 cm) de fio supercondutor, onde uma zona normal é criada numa das extremidades do condutor através de uma resistência de aquecimento. Avaliamos a velocidade de zona normal para um condutor multifilamentar de NbTi em matriz de cobre, com diâmetro do condutor de 0,68 mm e razão cobre/supercondutor 2,6. Os resultados são ajustados de acordo com o modelo analítico de Wilson, observando-se que, embora as amostras tenham sido testadas em banho de hélio líquido, o modelo que melhor se ajusta aos dados experimentais é o modelo adiabático.

Propriedades Geométricas de Redes de Vórtices.

BATISTA, A. DE A.; COUTINHO-FILHO, M. D.;
MORAES, F.

Depto. de Física - UFPE

Mapeamos no semiplano complexo superior as trajetórias correspondentes as redes de vórtices previstas pela minimização da energia livre do modelo de London anisotrópico, quando se varia a orientação do campo magnético aplicado (1). Demonstramos que as trajetórias correspondem a geodésicas do semiplano complexo superior dotado da métrica hiperbólica de Poincaré. Cálculos numéricos indicam que os operadores que transformam diferentes geodésicas correspondentes a uma mesma energia livre são elementos do grupo modular SL(2,Z). Estudamos também a influência de deformações elásticas de cisalhamento em 2-D(2) sobre estas trajetórias. Além desta abordagem de cálculos numéricos fizemos algumas simulações de redes de vórtices quando o campo está paralelo aos planos do supercondutor. O método de simulação utilizado foi o de Monte Carlo seguindo o algoritmo Metropolis usual. Durante toda a simulação o sistema de vórtices é uma rede de Bravais. Para cada uma das configurações há um ponto no semiplano complexo superior correspondendo à rede. Cada passo Monte Carlo aceito corresponde a um deslocamento deste ponto. Para o peso de Boltzmann utilizamos a energia livre do sistema:

$$W_x = \sum_{n>0} \frac{\sin^2(\pi \alpha n) \coth(nx)}{(\sinh^2(nx) + \sin^2(\pi \alpha n))nx} ;$$

onde x é proporcional ao campo magnético aplicado e α um parâmetro que define a rede (é o grau de liberdade do sistema na simulação). Verificamos que as trajetórias obtidas pelas simulações, à medida que a intensidade do campo (x) diminui, aproximam-se das trajetórias de energia livre mínima obtidas por L.S. Levitov(3) confirmando o fenômeno da filotaxia de vórtices nos supercondutores em camadas.

(1) L. J. Campbell, M. M. Doria & V. G. Kogan, Phys. Rev. B vol.38, 2439

(2) V. G. Kogan & L. J. Campbell, Phys. Rev. Lett. vol 62, 1552

(3) L. S. Levitov, Phys. Rev. Lett. vol. 66, 224

FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ DESOXIGENADO.

RODRIGUES JR, P.
UNIOESTE/FECIVEL - Paraná
PUREUR, P.; SCHAF, J.
Instituto de Física - UFRGS

Realizamos um estudo sistemático das flutuações na condutividade elétrica do Sistema $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ policristalino, em estados de oxigenação correspondentes a $0 \leq \delta \leq 0.15$. Na região normal, $T > T_c$, foram identificados três regimes Gaussianos. O expoente do regime mais afastado de T_c indica que, inicialmente, as flutuações se desenvolvem num espaço com geometria fractal, típica de um cluster de percolação. A medida que a temperatura se aproxima de T_c , se observa sequencialmente regimes Gaussianos homogêneos bi e tridimensionais. Nas vizinhanças imediatas de T_c , é sistematicamente observado um regime dominado por flutuações genuinamente críticas. O expoente crítico obtido reproduz a previsão da teoria de scaling dinâmico para o modelo XY-3D. Desta forma, os resultados de flutuações na condutividade elétrica no YBCO são consistentes com um parâmetro de ordem de Ginzburg-Landau com duas componentes, tal como previsto para um esquema de pareamento do tipo onda-S.

Estudo da Susceptibilidade Magnética de $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$

RETTORI, C.; BARBERIS, G. E.; PIRES, M. A.;
MARTINS, G. B.
Instituto de Física, Unicamp
VENEGAS, P. A.

Departamento de Física, Unesp-Campus Bauru

Desde o descobrimento de transições supercondutoras de alta temperatura crítica em compostos do tipo La_2CuO_4 , vários óxidos de cobre tem sido pesquisados. Recentemente tem despertado bastante interesse

compostos do tipo R_2CuO_4 ($R = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd$) devido a existência de uma transição supercondutora quando dopados com Ce . Vários estudos tem sido feitos das propriedades microscópicas destes compostos, principalmente através de espalhamento inelástico de neutrons, medidas de susceptibilidade magnética e ressonância paramagnética eletrônica. Neste trabalho, apresentamos o estudo teórico da susceptibilidade magnética em função da temperatura, em particular, estudamos a diminuição no parâmetro de campo cristalino B_2^0 do Pr em $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$.

MEDIDAS DE SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA-C.A. E DETERMINAÇÃO DE CAMPO CRÍTICO EM MONOCRISTAIS SUPERCONDUTORES UTILIZANDO-SE CÉLULAS DE GEOMETRIA APROPRIADA

ARNAULT, H. H.; RODRIGUES, C. L. C.;
DAMASCENO, O. DE O.

Departamento de Física, ICEx, UFMG, C.P. 702, Belo Horizonte, M.G. Brasil

THOLENCE, J. L.

Centre de Recherche sur les Très Basses Temperatures, CNRS-UJF, B.P.166 F38042, Grenoble Cedex 9, França

Para o estudo de monocristais supercondutores, utilizando-se espectroscopia de impedância, optamos por fabricar indutores com a forma de espirais de Arquimedes planas, no centro das quais são colocadas as amostras. O cálculo da indutância de um solenoide é extremamente simples. O mesmo não ocorre para espirais de Arquimedes planas. Neste caso os cálculos não se encontram na literatura corrente e são trabalhosos. Para desenvolvê-los nós separamos as duas contribuições: a indutância em cada espira provocada pelo fluxo magnético produzido por ela própria (auto-induções) e a indutância em cada espira provocada pelo fluxo magnético produzido por todas as demais (indutâncias mútuas). Pelo teorema da reciprocidade a soma das indutâncias que cada uma das espiras exteriores causa em cada uma das espiras interiores é igual à soma das indutâncias que cada uma das espiras interiores causa em cada uma das espiras exteriores. Assim, a indutância total da espiral é igual ao resultado de um primeiro somatório (auto-indutâncias) mais duas vezes o resultado de um segundo somatório (indutâncias mútuas). Em uma célula real, em espiral plana de Arquimedes, constituída de 43 espiras, os resultados calculados diferiram apenas em 4% dos resultados medidos. Apresentamos detalhes da montagem experimental utilizada e dos cálculos por nós desenvolvidos. Discutimos e analisamos também resultados de medidas feitas utilizando-se monocristais de Y-Ba-Cu-O preparados por diferentes métodos.

Workshop: Dinâmica de Vórtices
(SUC, EST, MMM) - 10/06/94

Dynamics of Flux Lines in High- T_c Superconductors: What Can Be Learned from Josephson Junction Arrays?*

STROUD, D. G.

Department of Physics, Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA

The behavior of flux lines in high- T_c superconductors shows a wide range of bizarre dynamical behavior arising primarily from the short coherence length and high transition temperature of these materials. In this talk, I will describe some recent model calculations carried out in my group, in which we describe some of this dynamical behavior in terms of the response of two and three dimensional networks of Josephson junction arrays. I will discuss (i) the increase in transition temperature arising from the presence of various types of point and line defects in such arrays in a magnetic field; (ii) the corresponding IV characteristics; and (iii) the transition from 2D to 3D vortices as a function of applied current in the so-called "flux transformer" geometry, in which current is applied in one layer, and extracted from another.

* Work carried out in collaboration with R. Šášik, W. Yu, K. H. Lee, and E. Roddick. I gratefully acknowledge support from the Midwest Superconductivity Consortium at Purdue University, through Department of Energy Grant DE-FG02-90ER-45427, and from NSF Grant No. DMR90-20994

LINHA DE IRREVERSIBILIDADES MAGNÉTICAS EM $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ POLICRISTALINO

PUREUR, P.; SCHAF, J.; RODRIGUES JR, P.; KUNZLER, J. V.

Instituto de Física, UFRGS, C.P. 15051, 91501-970, Porto Alegre, RS

Apresentamos medidas de susceptibilidade magnética DC no limite de campos inferiores a 7 kOe em $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7.5}$ policristalino. Enfatizamos sobretudo o comportamento detalhado da linha de irreversibilidade ZFC-FC, que é estudada em função do conteúdo de oxigênio na amostra. Observamos que esta linha mostra um crossover de um comportamento do tipo H em campos altos para uma dependência em H em campos baixos. Esta característica é análoga ao crossover induzido por anisotropia, da transição Gabay-Toulouse para a linha de Almeida-Thouless, típico dos sistemas vidros-se spin. Nossos resultados são discutidos com base num modelo de vidro-de-vórtices no limite sujo, onde a energia de carga dos grãos desempenha o papel de um termo de anisotropia uniaxial num Hamiltoniano do tipo XY.

RECENT DEVELOPMENTS ON FLUX PINNING AND CRITICAL CURRENT DENSITIES IN HT_cs

KES, P. H.

Kamerlingh Onnes Laboratorium, Leiden University, P. O. Box 9506, 2300 RA Leiden, The Netherlands

By studying general concepts of flux pinning insight is obtained in questions of critical current densities in high-temperature superconductors (HTS). The layered structure of these materials leads to very anisotropic transport properties which are reflected in the behaviour of the vortex lattice. The concept of vortex lines has to be replaced by that of very weakly coupled pancake vortices. A random distribution of point defects results in individual pinning of all pancake vortices. On the one hand, this leads to large (potential) critical current densities with values approaching the upper limit set by the depairing current. On the other hand, the pinning energy turns out to be unusually small with values comparable to the thermal energy. The critical state fastly decays to a metastable state of considerably lower current density. This still slowly relaxes, but on time scales that may become acceptable for practice purposes if the temperature is not too high. For strong-pinning line defects appreciable improvements are attainable up to vortex densities comparable to the concentration of line-defects. Several scenarios for remaining improvements are discussed.

Dinâmica de Vórtices (SUC) – 10/06/94

DYNAMICS OF VORTICES IN TWO-DIMENSIONAL SUPERCONDUCTORS

PIRES, A. S. T.; PEREIRA, A.
UFMG

Over the last years many theoretical and experimental studies of two dimensional granular superconducting systems have appeared in the literature. In general the superconducting grains are only weakly coupled and therefore at low temperatures the order parameter has a fixed modulus which is independent of any super current flow. It is the phase of the order parameter only which remains a degree of freedom for each grain. The configuration of the phases can be characterized by vortices and small amplitude oscillations. The vortices influence the transport properties of the system, and their interaction leads to a Kosterlitz-Thouless transition, which separates a superconducting, low temperature phase from a resistive high temperature phase. In our work we start with a granular superconductor film considered as an ordered two-dimensional square lattice where each site is occupied by a superconducting grain. The links between the sites correspond to Josephson junctions. Each grain has a capacitance C_0 to the ground and a capacitance C between neighbors. We write the Hamiltonian for the system in the continuum limit and then derive the equation of motion for the vortices using the Lagrangian formulation. We calculate the effective mass and discuss the effect of damping.

ESTUDO DA LINHA DE IRREVERSIBILIDADE EM $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ TEXTURIZADO POR FUSÃO*

ANDRADE JUNIOR, R. DE; LIMA, O. F. DE
UNICAMP-Instituto de Física

Os novos supercondutores de alta temperatura crítica apresentam em medidas de magnetização um trecho reversível grande quando comparados aos supercondutores convencionais, a importância deste trecho vem do fato de que ele está associado à uma região de corrente crítica nula. O ponto final deste trecho reversível define uma linha no diagrama H vs. T denominada de Linha de Irreversibilidade. A origem da linha de irreversibilidade é controversa, discutindo-se se ela representa apenas uma linha de "depinning" ou a fusão da rede de vórtices. Nesta comunicação apresentamos a linha de irreversibilidade para uma amostra de $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ texturizada por fusão (melt-textured-growth), obtida a partir de medidas de magnetização (SQUID-magnetometer) com a temperatura de irreversibilidade tomada no ponto final do trecho reversível de

curvas $M_{fcw}(T)$ e $M_{rem}(T)$. A linha de irreversibilidade, para campos no intervalo de 1 a 50 KOe, parece obedecer a equação para a fusão da rede de fluxóides devida a Houghton, Pelcovitz and Sudbø, ajustando os dados com um número de Lindemann $c_L \approx 0.13$. A equação de "depinning" $H \propto [1 - (T/T_c)^2]^n$, devida a Matushita e colaboradores (Appl. Phys. Lett. 56, 2039(1990)) ajusta os dados igualmente bem, para $n \approx 1.95$. Já a Lei de Potências $H \propto [1 - (T/T_c)]^{3/2}$ não se ajusta bem aos dados, o que descarta o modelo de "Giant Flux Creep" e comportamentos do tipo da "quasi de Almeida-Thouless line".

*Este trabalho foi parcialmente financiado pelo CNPq e FAPESP

ANISOTROPIA DA LINHA DE IRREVERSIBILIDADE MAGNÉTICA NO $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ E $Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_y$ MONOCRISTALINO E EM SISTEMAS DE GRÃOS ORIENTADOS.

SCHAF, J.; RODRIGUES, P.; PUREUR, P.

Instituto de Física da UFRGS

GHIVELDER, L.

Universidade Federal do Rio de Janeiro

TESSLER, L. R.

CRISMAT - ISMRA, Caen, França

TAYLOR, K. N. R.

University of New South Wales, NSW - Austrália

O "pinning" do fluxo magnético nos supercondutores de alto- T_c é conhecidamente dependente do ângulo entre o campo aplicado \vec{H} e o eixo \hat{c} do monocristal, por causa do "pinning" intrínseco, que decorre da natureza planar. Uma questão de importância fundamental é saber se a irreversibilidade, o "pinning" crítico é também anisotrópico, pois isto exigiria uma termodinâmica anisotrópica. No presente trabalho investigamos a irreversibilidade magnética de monocristais de $Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_y$ e $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ e de sistemas de grãos orientados como função do campo \vec{H} e da temperatura, para $\vec{H} \parallel \hat{c}$ e $\vec{H} \perp \hat{c}$. Em todos os casos as linhas de irreversibilidade $T_g(H)$ são diferentes para $\vec{H} \parallel \hat{c}$ ou $\vec{H} \perp \hat{c}$. No monocristal [2212], onde a anisotropia é grande, medimos o limite de irreversibilidade $T_g(\theta)$ em função do ângulo $\theta = \vec{H} \wedge \hat{c}$ para várias intensidades de \vec{H} . Verificamos que $T_g(\theta)$ varia suavemente para direções de \vec{H} ao redor de \hat{c} , mas apresenta um pico de forma Gaussiana ao redor da direção $\perp \hat{c}$, tornando-se tanto mais agudo quanto mais forte \vec{H} . Estes resultados mostram que o "pinning" intrínseco joga um papel relevante no "pinning" crítico, tornando a irreversibilidade dependente do ângulo θ .

A Linha de Irreversibilidade em Nb com Diferentes κ

LIMA, O. F. DE; ANDRADE JR, R. DE

Instituto de Física-UNICAMP, 13083-970 Campinas, SP

Linhas de irreversibilidade, separando uma região reversível de outra irreversível num diagrama H vs. T , têm sido identificadas para todos os supercondutores de alta T_c e também para materiais de baixa T_c tais como o Nb, NbTi e Nb₃Sn. Entretanto, os processos básicos que estariam envolvidos neste fenômeno não estão ainda bem entendidos. Nesta comunicação apresentaremos resultados para a linha de irreversibilidade $0.7 < (T/T_c) < 1$, obtidos através de curvas de magnetização DC (magnetômetro SQUID), para dois tipos de amostras de Nb: 1) pó de Nb oxidado ($T_c=7.66K$, $\kappa=6.5$); 2) esfera ($r=3mm$) de alta pureza ($T_c=9.20K$, $\kappa=1.5$). Nos dois casos a equação para a fusão da rede de Abrikosov (A. Houghton et al. PR B 40, 6763 (1989)) ajusta-se bem nas linhas de irreversibilidade, produzindo constantes de Lindemann $c_L \approx 0.03$ ($\kappa=6.5$) e $c_L \approx 0.01$ ($\kappa=1.5$). Uma equação do tipo $H \propto [1 - (T/T_c)^2]^n$, derivada na teoria de *creep* coletivo (T. Matsushita et al., Appl. Phys. Lett. 56, 2039 (1990)), também ajusta muito bem os dois conjuntos de dados, com $n \approx 1.11$ ($\kappa=6.5$), e $n \approx 1.25$ ($\kappa=1.5$). Por outro lado, a lei de potência $H \propto (1 - T/T_c)^{1.5}$ claramente não se ajusta bem aos dados, indicando que uma linha do tipo *quasi-deAlmeida-Thouless*, está descartado no presente estudo.

*Trabalho parcialmente financiado pela FAPESP e CNPq.

MACROSCOPIC QUANTUM TUNNELING PHENOMENA IN $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ HIGH- T_c SUPERCONDUCTOR

MOEHLECKE, S.; KOPELEVICH, Y.

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

In bulk sample of $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ two types of magnetic relaxation were found: for magnetic fields exceeded an intragrain lower critical field H_{c1A} it was mostly due to a creep of Abrikosov vortices, while for lower fields ($H \ll H_{c1A}$) the relaxation was governed only by the creep of Josephson intergrain vortices. At low temperatures and $H \gg H_{c1A}$ the quantum tunneling of Abrikosov vortices could be clearly observed as well

as its T^2 thermally assisted temperature dependence. This is the first observation of the phenomenon of macroscopic quantum tunneling in this material. In the single vortex pinning regime the tunneling rate is observed to increase with the applied magnetic field and saturate in the high field limit. This behavior could be explained [1] within a quantum collective creep theory [2] taking into consideration the reduction of the collective pinning length when the 3D to 2D dimensional crossover of the vortex ensemble occurs. Within this scenario we can understand both field dependent and field independent quantum flux creep observed in high- T_c superconductors. Here we also discuss at low magnetic fields ($H \ll H_{1cA}$) a possible macroscopic quantum tunneling of intergrain Josephson vortices.

[1] S.Moehlecke and Y.Kopelevich, Physica C March 1994 (in press). [2] G.Blatter, V.B.Geshkenbein, and V.M.Vinokur, Phys.Rev.Lett. 66, 3294 (1991)

This work was partially supported by FAPESP (proc. 91/0573-0 and 92/3292-4)

Evidência experimental de flutuações de vórtices em YBaCuO, $T_c = 92K$.

SALEM-SUGUI JR, S.

IFGW-UNICAMP

SILVA, E. Z. DA

IFGW-UNICAMP

Medidas de magnetização em monocristais de YBaCuO com $T_c = 92K$ para H aplicado paralelo e perpendicular ao eixo c , mostram em cada caso a existência de uma temperatura T^* para a qual a magnetização $M(T^*)$ é independente do campo aplicado. Este resultado é interpretado como sendo devido a flutuações de vórtices para um supercondutor anisotrópico 3D. Esta formulação baseia-se num scaling dos resultados de Bulaevskii et al.[1] originalmente concebidos para um modelo de supercondutor em camadas (layered superconductor) presentemente adaptado para o limite do sólido anisotrópico em 3-D.

[1] L. N. Bulaevskii, M. Ledvij, and V. G. Kogan, Phys. Rev. Lett. 28, 3773 (1992)

Trabalho Parcialmente financiado pela FAPESP, CNPq e FAEP-UNICAMP

SUPERFÍCIES E FILMES FINOS

Workshop: Caracterização de Superfícies e Aplicações (SUF) - 08/06/94

AUGER AND CHARACTERISTIC-LOSS LINESHAPE ANALYSES

MADDEN, H. H.

Visiting Scientist, Grupo Física de Superfícies UNICAMP-IFGW/Campinas, SP

•The lineshapes of derivative Auger signals commonly serve as "fingerprints" of the chemical state(s) of surface atoms. Such simple usage fails to give clear-cut information when more than about two chemical species of a given type of atom occur on the surface, however. Following integration, background subtraction and loss-deconvolution, component Auger signals are usable for synthesizing more complex signals. Signals from surfaces containing multiple chemical states for a given type atom are superpositions of single-chemical-state components. The decomposition of the Si-L_{2,3}VV signal from a silicon oxy-nitride sample into component signals will illustrate this. The components in this example are signals for elemental-Si, Si-oxide, Si-nitride and Si-hydride. Core-level characteristic-loss-spectroscopy (CLS) signals can also show large changes in shape and energy location upon changes in surface chemistry. CLS data from studies of the oxidation of Be and of Al surfaces illustrate this situation. •Surface information of a more basic physical nature is also obtainable from analyses of Auger-Electron-Spectroscopy (AES) and CLS lineshapes. AES lines that involve valence electrons may sometimes yield valence-band (VB) density-of-states (DOS) information. An analysis of the Be-KVV lineshape, and of the attendant "distortions" associated with the effective transition probabilities, illustrates this use of Auger data. Hole-hole correlation effects can, however, result in core-valence-valence AES lineshapes with little remaining VB-DOS information. This situation is found for the Cu-MVV signals. Analyses of these lineshape distortions yield, alternatively, information about this hole-hole interaction in the VB of such metals. Hole-hole interactions that result in Auger lineshape departures from simple VB-DOS character are also important in such surface processes as the stimulated desorption of hydrogen from silicon hydride surfaces. CLS signals involving conduction-band (CB) levels give complementary CB-DOS information to the VB-DOS information provided by AES. Analysis of the K-CLS signal from Be surfaces illustrates this use of CLS, and the special complications encountered in such analyses. Similar data from a study currently in progress at UNICAMP for Al films will also be discussed.

EVOLUÇÃO DE HIDROGÊNIO E CRISTALIZAÇÃO DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO INDUZIDA PELO SILICETO DE COBRE

ACHETE, C.; BERNARDINO, L.

Programa de Materiais/COPPE/UFRJ, C.P. 68505

FREIRE JR, F. L.

Laboratório Van de Graaf, PUC-Rio

A reação na interface filme fino de cobre sílico amorfo hidrogenado (α -Si:H) e a cristalização induzida pelo siliceto de cobre foi estudada pela combinação de diversas técnicas analíticas: medida de resistência de folha "in-situ", efusão de gases, microscopia eletrônica de varredura, espectroscopia de elétron Auger, espectroscopia Raman, microscopia de força atômica (AFM) e técnica nucleares. Filmes de cobre com espessura variando entre 20 nm e 90 nm foram evaporados sobre silício amorfo hidrogenado (espessura de 2000 nm) o qual foi depositado por "R. F. glow discharge" sobre substratos de silício monocristalino. As amostras foram aquecidas a temperaturas variando entre 100 C e 800 C em um forno a vácuo usado para as experiências com efusão de gases. Os resultados mostram que o tratamento térmico de 30 min a temperatura de 150 C é suficiente para provocar a total reação de um filme de 80 nm de Cu formando Cu₃Si. O processo de cristalização do silício inicia-se a temperatura tão baixas quanto 280 C. Observações com a microscopia eletrônica de varredura e AFM e AFM indicam que a cristalização não ocorre de forma dendrítica. O hidrogênio liberado durante a reação é liberado somente após iniciar a cristalização do silício.

SURFACE CHARACTERIZATION BY PHOTON EXCITED CORE LEVEL ELECTRON SPECTROSCOPIES

LANDERS, R.
IFGW - UNICAMP

In all electron spectroscopies, energy analysis of electrons emitted from the solid surface is used to gain information on the electronic energy levels in the surface region. When one is interested in core levels, the most commonly used excitation source is an X-Ray beam containing characteristic lines. Of these, the most commonly used are the K_{α} X-Ray lines from Mg (1253,6 eV) and from Al (1486,6 eV). One usually is interested in photoelectrons or Auger electrons emitted from the surface. The mechanisms for the excitation of photoelectrons and Auger electrons are quite different, but both yield information on the chemical composition and, in some cases, crystallography of the surface. X-Ray excited photoelectron spectroscopy (XPS or ESCA) is, in principle, a simple process. A photon of energy $h\nu$ impinges on the surface and is absorbed by an electron with E_b binding energy below the vacuum level. The electron then emerges with a kinetic energy of $(h\nu - E_b)$. In reality, the process is more complicated. E_b for a given level in a given atom depends on the chemical environment of the atom, the electron can suffer losses as it leaves the atom or the solid, the final state of the atom as seen by the receding electron can be different depending on the magnitude of $h\nu$ and, finally, diffraction by the atomic planes can modify the observed intensity of a given transition. Auger electrons are emitted when ionized core levels in atoms decay. The kinetic energy and intensity of the emitted electrons are subject to many of the same mechanisms affecting photoelectrons. We will show how these effects can be used to obtain information about the electronic structure and chemical composition of surfaces. For example, we will show that the magnitude of the charge transfer between the components of the binary alloy Au_xPd_{1-x} is small and that it is possible to estimate that the Au atoms gain about 0.2 sp-electron/atom and lose the same number of d electrons.

APLICAÇÕES DA ANÁLISE DE SUPERFÍCIES NA CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

NASCENTE, P. A. DE P.

Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos

Nesta comunicação apresentamos um sistema para análise de superfícies que configuramos de forma a abranger as técnicas XPS, AES, ISS, SAM e XPI. Este equipamento será brevemente instalado no Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais (CCDM), que está sendo implantado na UFSCar, com a participação da UNESP. Este centro tem como objetivo a prestação de serviços de apoio à pesquisa e ao desenvolvimento técnico e científico na área de materiais. Cada técnica analítica de superfície fornece informações específicas sobre a composição da superfície de um material. A espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS), também conhecida como espectroscopia de elétrons para análise química (ESCA), permite a identificação do estado químico, enquanto que a espectroscopia de elétrons de Auger (AES) dá a distribuição espacial dos elementos presentes, já que possui melhor resolução lateral. Ambas são sensíveis à região de 5 a 30 Å próxima à superfície, que corresponde ao livre caminho médio dos elétrons ejetados com energia cinética na faixa de 100 a 1000 eV. Ambas também são capazes de produzir imagens bidimensionais das superfícies e as técnicas correspondentes são denominadas imageamento de fotoelétrons excitados por raios-X (XPI) e microscopia de Auger de varredura (SAM). Um canhão de íons, imprescindível à limpeza das amostras, pode ser usado, em combinação com XPS ou AES, no perfilamento de profundidade por erosão iônica até alguns microns da superfície. O espalhamento inelástico dos íons, geralmente de argônio, permite a determinação qualitativa da composição superficial pela distribuição energética dos picos na espectroscopia por espalhamento de íons (ISS). Serão apresentadas algumas aplicações da análise de superfícies na caracterização de materiais metálicos, cerâmicos, poliméricos e compostos.

Física de Superfícies I (SUF) -- 08/06/94

CARACTERIZAÇÃO SUPERFICIAL DE CATALISADORES DE CU-CO/SIO₂ POR XPS

SALIM, V.; SCHMAL, M.
NUCAT/PEQ/COPPE/UFRJ

PASA, A. A.

Departamento de Física/UFSC e NUCAT/COPPE/UFRJ

CASTNER, D.; CAMPBELL, C.

Universidade de Washington - Seattle

A adição de um segundo metal ao sistema catalítico metálico (metal/suporte) produz modificações sensíveis nas suas propriedades catalíticas e físico-químicas. A determinação da composição e dos estados de oxidação dos metais presentes na superfície é importante para a compreensão das possíveis interações metal-metal e metal-suporte e da relação entre atividade catalítica e propriedades físico-químicas dos catalisadores. No presente trabalho a técnica de espectroscopia de fotoelétrons produzidos por raios X (XPS - X-rays Photoelectron Spectroscopy) foi utilizada para caracterizar a superfície de precursores dos catalisadores bimetalícos de Cu-Co/SiO₂, onde a sílica usada como suporte é uma terra diatomácea com baixa área superficial. Determinou-se a composição e os estados de oxidação dos metais na superfície para precursores preparados a partir de diferentes teores de metal sobre o mesmo suporte de sílica.

STUDIES OF THE LOCAL REACTIVITY OF SURFACES USING CHEMICAL BASED PRICIPLES

PIQUINI, P.; FAZZIO, A.

USP

PINO JR, A. D.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

We apply the local version of the Hard and Soft Acids and Bases (HSAB) principle to infer the chemical reactivity of surface-like systems. Based on properties of the isolated reactants, the HSAB principle allow us to predict the most reactive sites of a polyatomic system. For the sake of simplicity the surface was simulated by a planar cluster (Ga_2As_2). We perform an *ab-initio* all-electron self-consistent-field calculation to determine the electronic and structural properties of the cluster and the probe atoms (*Na*, *Al*, *As* and *Cl*) that are supposed to react with it. The predictions based on the HSAB principle are compared against total energy calculations of the system (atom+cluster) in configurations where we expect the reaction initiate. The results encourages one to apply this method to a large variety

of problems that involve chemical reactions of complex systems.

THE ELECTRONIC STRUCTURE AND SPIN-STATE TRANSITION OF LaCoO₃

ABBATE*, M.

*Solid State Spectroscopy, University of Nijmegen,
Toernooiveld 1, 6525 ED Nijmegen, The Netherlands*

We present and discuss the O 1s and Co 2p x-ray absorption spectra (XAS) of LaCoO₃ taken at different temperatures in the range 80-630 K. The shape of the multiplets in the Co 2p XAS spectra conveys information on the symmetry and spin of the ground state. The O 1s XAS spectra are related to unoccupied metal bands through covalent mixing. The changes in the spectra taken at different temperatures provide information on the spin-state transition of this compound. At low temperatures, 80 and 300 K, the material is in a highly covalent low-spin state. The main contribution to the ground state in this case is given by $t_{2g}^6(1A_1)$ with an occupancy of 0.56. At higher temperatures, 550 and 630 K, the results indicate a gradual transition to a mixed-spin state. The main contribution to the high-spin part of the mixture is given by $t_{2g}^4e_g^2(5T_2)$ with an occupancy of 0.71. There is no evidence of charge disproportionation in the temperature range 80-630 K. The O 1s XAS spectra reflect important changes in the unoccupied Co 3d bands across the spin-state transition. Other changes in the O 1s XAS spectra are attributed to local distortions in the mixed-spin state caused by the different size of the high-spin and low-spin Co³⁺ ions. We present also complementary valence-band photoelectron spectra (XPS) of LaCoO₃ measured in the temperature range 80-570 K. The changes in the valence-band spectra are in agreement with the decrease of the low-spin component at high temperatures (420-570 K).

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES DAS SUPERFÍCIES DOS CRISTAIS FCC

TRETIKOV, N.; ZUBOV, V.

Universidade Federal de Goiás

Usando o método não-simetrizado do campo auto-consistente na aproximação de fraca anarmonicidade foi efetuado o cálculo das propriedades das superfícies singulares do cristal-FCC: estruturais (distâncias interatômicas e interplanares, relaxação da rede), dinâmicas (amplitudes médias quadráticas das vibrações) e termodinâmicas (densidades de energia e energia livre de superfície, tensão superficial e outras) [1]. Estas propriedades foram calculadas com a consideração das correções quânticas na aproximação quasi-clássica. A dependência em temperatura desta última e totalmente devido à anarmonicidade. A anarmonicidade produz também um aumento linear da capacidade

térmica superficial a altas temperaturas, o que tem lugar para todas as superfícies singulares: (001), (111) e (011). Nota-se o sinal negativo da tensão superficial para algumas faces (por exemplo (111)). Isto está de acordo com dados experimentais indiretos de medidas das distancias interatômicas em pequenas partículas. Percebe-se uma relaxação não-monótona das distancias interplanares perto da superfície (para (011)), o que também se observa no experimento. Cálculos numéricos foram feitos para potenciais de pares de curto alcance, característicos para os cristais moleculares (do tipo Morse e Lennard-Jones).

1. V.I. Zubov, I.V. Mamontov, N.P. Tretiakov, Internat. Journal of Modern Physics B6, 197(1992).

ESTUDO DA ESTRUTURA ATÔMICA DA SUPERFÍCIE (110) DO InSb ATRAVÉS DO "AUTOMATED TENSOR LEED PROGRAM".

SOARES, E. A.; CARVALHO, V. E. DE
Departamento de Física - UFMG
CASTILHO, C. M. C. DE
Instituto de Física - UFBA

A determinação da estrutura atômica de superfícies tem sido basicamente realizada através da técnica de Difração de Elétrons Lentos (LEED). Embora um grande número de superfícies já tenha sido resolvido, ainda existem muitos sistemas que não foram estudados, como por exemplo, aqueles envolvendo interfaces do tipo metal-semicondutor ou semicondutor-semicondutor. A principal dificuldade encontrada no estudo de tais sistemas tem sido a limitação apresentada pelos programas usados no cálculo das curvas $I(V)$ envolvendo espalhamento múltiplo dos elétrons no sólido. Esses programas, além de requererem grande espaço de memórias, requerem longo tempo computacional, tornando o estudo de certos sistemas, viáveis apenas através de computadores super-velozes (tipo CRAY). Face a estas dificuldades vários grupos envolvidos com a análise LEED vêm trabalhando, nos últimos anos, no sentido de desenvolver programas que resultem em economia de tempo de computação. Assim, diversos métodos de otimização e automatização têm sido testados e um dos programas resultante desses estudos é o "Automated Tensor LEED Program" (ATLP), desenvolvido recentemente pelo grupo do Prof. M. A. Van Hove da Universidade de Berkeley. Este programa parece representar um grande avanço na metodologia de determinação estrutural de superfícies via LEED, principalmente no caso das superfícies (110) dos compostos semicondutores do grupo III-V, os quais exibem acentuada distorção nas posições atômicas da superfície em relação aquelas do volume. Com o objetivo de testar este novo programa escolhemos a superfície (110) do InSb, que já teve sua estrutura investigada através do conjunto de programas denominado CAVLEED. O programa ATLP foi

implantado numa Sun Sparc station SLC, onde todos os cálculos foram realizados. Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos através da comparação das curvas $I(V)$ teóricas com dados experimentais onde foi possível obter um refinamento da estrutura proposta para a superfície, bem como investigar o efeito de parâmetros não estruturais na determinação da estrutura, como por exemplo a Temperatura de Debye para a superfície.

MONTE CARLO STUDY OF SURFACE SEGREGATION OF Pt-Rh ALLOYS

FLORENCIO JR, J.
Pennsylvania State University

We calculate the composition depth profile of Pt-Rh alloys below the (100) unreconstructed surface for several bulk compositions. Our method is a Monte Carlo simulation with Kawasaki dynamics on a slab containing sites of a fcc lattice which are occupied by Pt and Rh atoms. Periodic boundary conditions are imposed on the planes parallel to the surface. The effective atomic interaction energies are taken to be pairwise as in the embedded atom method. We find an oscillatory behavior in the composition depth profile of the alloy, with enrichment of Pt in the surface layer and its depletion on the subsurface layer. Our results are then compared with the data from the field ion microscopy experiments which also shows oscillatory segregation in Pt-Rh.

Work supported in part by NSF grant DMR9117061.

Física de Superfícies e Multicamadas (SUF) - 08/06/94

TEORIA DAS PROPRIEDADES ATÔMICAS DAS SUPERFÍCIES NÃO-SINGULARES E VICINAIS DE UM CRISTAL COM REDE CÚBICA SIMPLES

TRETIKOV, N.; ZUBOV, V.
Universidade Federal de Goiás
BAZIRUWIHA, J.

Universidade Russa da Amizade dos Povos

Usando o método correlativo do campo autoconsistente não-simetrizado na aproximação de fraca anarmonicidade (expansão de baixas temperaturas) foram estudadas as propriedades das superfícies (0kl) da rede cúbica simples com valores arbitrários dos índices de Miller. Estas superfícies são constituídas de degraus de altura unitária, que são partes da superfície (001). Foram calculadas as componentes normal e tangencial da relaxação dos átomos da superfície além das amplitudes médias quadráticas das vibrações dos átomos.

As funções termodinâmicas da superfície foram obtidas em dependência de sua orientação - o ângulo φ entre a superfície dada e a superfície (001). Foi construído o diagrama de Wulf, isto é o gráfico da energia livre superficial $\sigma(\varphi)$ em coordenadas polares. Ela tem um mínimo absoluto nos nós $0, \pm\frac{\pi}{2}, \pm\pi$ e mínimos locais em $\pm\frac{\pi}{4}, \pm\frac{3\pi}{4}$. A função σ é máxima perto da superfície (011). Nos pontos $\arctan \frac{1}{2}, \arctan \frac{1}{3}$ (e nos pontos equivalentes ou outros) a função não é diferenciável. À direita e à esquerda destes pontos $\frac{\partial\sigma}{\partial\varphi} > 0$, por isso eles não são pontos de mínimo. O salto da derivada nestes pontos é proporcional à temperatura e desaparece quando ela tende a zero. Quando o ângulo tende a zero (superfície (001)), a densidade de energia livre de superfície não somente não é derivável como também não tende ao seu valor para esta superfície. Esta peculiaridade é própria deste tipo de rede. Os resultados obtidos acham-se em concordância com os obtidos anteriormente para uma rede quadrada plana [1].

1. V.I. Zubov, F. Banyeretse, Int. J. Mod. Phys. B6, 479(1990).

ESTUDO DE FILMES FINOS Eu/Cr POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER NO ^{151}Eu E DIFRAÇÃO DE RAIO-X.

FLORES, W. H.; SCHREINER, W. H.; CUNHA, J. B. M. DA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Foi preparada uma multicamada por evaporação sequencial de 4 camadas de 150 Å de Eu e 5 de 150 Å de Cr e uma bicamada com 700 Å de Eu e 300 Å de Cr sob um substrato de Si (111). A última camada depositada sempre foi Cr, para evitar a oxidação do Eu. A estrutura dos filmes foi caracterizada por difração de raio-x (R-x) e o estado de valência do Eu foi determinado por espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS). Os resultados de R-x mostram a presença de Eu e Cr metálicos e por CEMS observamos a presença de Eu^{2+} , com deslocamento isomérico característico do Eu metálico. No caso da bicamada, após um tratamento térmico em alto-vácuo a 350 °C por uma hora, observamos a presença de Eu metálico, Cr metálico, EuO e pequena quantidade de Eu_2O_3 na análise de R-x. Por CEMS observamos Eu^{2+} correspondente ao Eu e EuO e Eu^{3+} provavelmente devido a Eu_2O_3 amorfo, já que a percentagem de Eu^{3+} observada por CEMS é maior que a fase cristalina do Eu_2O_3 observada no R-x. Não foi observada interdifusão entre as multicamadas, já que Eu e Cr são insolúveis.

ESTUDO DA MULTICAMADA Eu/Fe POR ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER E DIFRAÇÃO DE RAIO-X.

FLORES, W. H.; SCHREINER, W. H.; CUNHA, J. B. M. DA

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Foi preparada uma multicamada por evaporação sequencial de 20 camadas de 30 Å de Eu e 20 de 30 Å de Fe sob um substrato de Si (111). A última camada depositada foi Fe, para evitar a oxidação do Eu. A estrutura da multicamada foi caracterizada por difração de raio-x (R-x) e o estado de valência do Eu foi determinado por espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS). Os resultados de R-x mostram a presença de Eu e Fe metálicos e pequenas quantidades de EuO. Por CEMS observamos a presença de Eu^{2+} , com deslocamento isomérico característico do Eu metálico. Foram feitos tratamentos térmicos a 320 °C numa pressão de 10^{-2} torr por 1, 3, 6 e 9 horas. Os resultados de R-x e CEMS no ^{151}Eu e ^{57}Fe , mostram que o Eu é rapidamente oxidado e a presença de Fe_3O_4 com uma proporção relativa ao Fe que aumenta com o tempo de recozimento. Os ajustes dos espectros Mössbauer no ^{57}Fe , sugerem uma distribuição de campos hiperfinos para a magnetita, com valores médios menores que para amostras massivas. Não foi observada interdifusão entre as multicamadas, já que Eu e Fe são insolúveis.

Espectros Auger $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ de Pd e Rh

LANDERS, R.; DECASTRO, S. C.; KLEIMAN, G. G. IFGW-UNICAMP

Foram investigados os espectros Auger $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ de Pd e Rh excitados por bremsstrahlung. As linhas experimentais são razoavelmente descritas por cálculos baseados num modelo atômico, no qual o estado inicial é tratado por acoplamento jj e o estado final por acoplamento intermediário. Estruturas de perda são observadas no lado de menor energia das linhas principais. Essas perdas parecem ter origem atômica e não estão presentes nos espectros correspondentes de In, Sn e Sb. Demonstramos que essas perdas são consistentes com um modelo de satélites shake-up envolvendo vacâncias da banda d. Transições Coster-Kronig, como observadas para Cu, não parecem existir.

APLICAÇÃO DE FEIXES DE ÍONS NA ANÁLISE DE FILMES FINOS BASEADOS NA COMPOSIÇÃO DO NITRETO DE TITÂNIO

ALEXANDRE, J. L.; BAUMVOL, I. UFRGS

Neste trabalho descrevemos a utilização de técnicas que usam feixes de íons como instrumento na análise de materiais. As técnicas são Análise por Reação Nuclear e Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford (RBS). As amostras analisadas tem como base o Nitreto de Titânio, mais especificamente com estrutura de filmes finos compostos por vários elementos como Ti(C,N) e (Ti,Al)N. Também analisamos a estrutura de

multicamadas de filmes finos do tipo TiN/Ti, AlN/Al com interfaces abruptas e de composição gradual. Os filmes baseados na composição do Nitreto de Titânio, por ser um material ultra-duro, são geralmente utilizados como revestimento protetor, aumentando desta forma a performance de ferramentas e consequentemente diminuindo os custos. Os filmes foram depositados por magnetron sputtering reativo e por IBAD (deposição assistida por feixes de íons) sobre substratos de silício e polimida, possibilitando comparar as alterações na densidade, porosidade e textura dos filmes obtidos por estes dois métodos de deposição. Na caracterização feita com RBS, utilizamos partículas α com energia entre 0,76 e 2,50 MeV. Para análise por Reação Nuclear foram utilizadas as ressonâncias $^{14}\text{N}(p,\gamma)^{15}\text{O}$, $^{27}\text{Al}(p,\gamma)^{28}\text{Si}$ induzidas por prótons com energia entre 276 e 330 KeV e $^{14}\text{N}(d,\alpha)$ com energia de deuteron de 1,45 MeV. Com os resultados obtidos por estas técnicas (e através da simulação dos espectros de RBS usando o programa RUMP) foi possível estabelecer a composição, espessura e o perfil em profundidade dos revestimentos. Além disso, estabelecemos correlações entre os parâmetros de deposição, composição e estrutura.

ESTUDO DO PAPEL DA TEMPERATURA NA DESSORÇÃO DE H^+ INDUZIDA POR FEIXES DE NITROGÊNIO.

PEREIRA, J. A. M.; SILVEIRA, E. F. DA; LEITE, C. V. B.; JERONYMO, J. M. F.

Depto. de Física - PUC-Rio

BAPTISTA, G. B.

Depto. de Física - UENF

O acelerador Van de Graaff da PUC-Rio foi utilizado para produzir feixes de nitrogênio (2.5 MeV) com diversos estados de carga ($q = +1$ a $+5$). Amostras de LiF e Cu foram bombardeadas por estes feixes a diferentes temperaturas. Os íons H^+ , provenientes do gás adsorvido e identificados pela técnica de tempo-de-vôo, tiveram seu rendimento de dessorção medido em função da temperatura da amostra ($T = 25^\circ\text{C}$ até 100°C) e do estado de carga do projétil. A pressão da câmara foi mantida em 10^{-6} Torr. Os dados obtidos podem ser descritos pela função $Y_{\text{H}^+} = Y_0(T) \times (1 + aq^3)$, sendo o parâmetro $a (= 0.020 \pm 0.005)$ aproximadamente o mesmo para todos os casos estudados. O fato de apenas Y_0 depender da temperatura conduz a interpretação de que a diminuição de Y_{H^+} é consequência da variação da cobertura θ (P,T) do gás adsorvido. A constatação de que o parâmetro a não depende do substrato sugere que o processo de dessorção do H^+ está essencialmente ligado a interação direta do projétil com moléculas do gás adsorvido.

DEPENDÊNCIA DA EMISSÃO DE ÍONS SECUNDÁRIOS COM O ÂNGULO DE INCIDÊNCIA DE PROJÉTEIS RÁPIDOS

PEREIRA, J. A. M.; SILVEIRA, E. F. DA

Depto. de Física - PUC-Rio

FERRELL, W. R.; SCHWEIKERT, E. A.

CCCA-Texas A&M

Fragmentos de fissão emitidos por uma fonte de ^{252}Cf (energia típica de 1 MeV/u) foram utilizados para o bombardeio de uma amostra de CsI. Os íons secundários emitidos pela amostra foram analisados pela técnica de tempo de-vôo e tiveram sua taxa de emissão medida em função do ângulo de incidência dos projéteis. Para os íons H^+ , H_2^+ , H_3^+ (provenientes de gases adsorvidos na amostra) e Cs^+ , observou-se que a taxa de emissão tem uma dependência do tipo $1/\cos\theta$, onde θ é o ângulo da direção de incidência com a normal à superfície. Mediu-se também a dependência da taxa de emissão simultânea de dois íons secundários. Verificou-se que a correlação entre H^+ , Cs^+ e H_2^+ , Cs^+ é fortemente afetada por uma mudança no ângulo de incidência, apresentando uma tendência a randomicidade para ângulos razantes. Um modelo geométrico permite uma explicação para essa observação.

Cálculo da Densidade Espectral de Impureza de Dois Centros em Superfície Metálica

YOSHIDA, M.

Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro

OLIVEIRA, L. N. DE

Departamento de Física, IFQSC, USP, São Carlos

Procura-se modelar um sistema constituído de uma impureza adsorvida em uma superfície metálica onde apenas dois de seus orbitais é levado em consideração. Estes orbitais interagem eletrostaticamente com os da banda de condução metálica. Não é considerado o spin dos elétrons. Supõe-se que os orbitais de impureza estejam acoplados entre si e que a transição de um elétron de um orbital a outro induza excitações na banda de condução. O objetivo é calcular a densidade espectral de impureza nesse sistema, que fornece o espectro de fotoemissão eletrônica em metais assim como permite escrever propriedades ópticas como a absorção e emissão de Raios-X. A densidade espectral será calculada numericamente utilizando a técnica de Grupo de Renormalização (Ref. M. Yoshida, M. A. Whitaker e L. N. de Oliveira, Phys. Rev. **B** 41 9403 (1990)).

Adsorção de Te em InAs

SILVA, R. C. DA; FERRAZ, A. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Um dos principais objetivos na atual Ciência dos Materiais é a associação de materiais com propriedades diferentes visando o desenvolvimento tecnológico na fabricação de dispositivos, como na deposição de metais em superfícies semicondutoras. Com a evolução das técnicas de crescimento Molecular Beam Epitaxy (MBE) e Metalorganic Vapor-Phase (MOVPE), obtêm-se com sucesso deposições ultrafinas de átomos ou conglomerados atômicos em superfícies semicondutoras. Desta forma, um problema de interesse a ser analisado, se refere à estabilidade da interface: superfície - átomo (material) adsorvido. Um exemplo desse problema é a deposição de InAs em uma superfície de GaAs, crescida ao longo da direção [001], que se limita ao máximo de 1,5 monocamadas, ocorrendo formação de ilhas após esta espessura. Recentes trabalhos revelam uma mudança desse comportamento, quando se precede a deposição de InAs com aproximadamente uma monocamada de Te sobre o GaAs. Com tal procedimento estende-se de 1,5 para 6,0 monocamadas possíveis de InAs depositadas agora sobre o Te. Verifica-se ainda, o surgimento de 0,5 monocamada de Te na superfície do InAs depositado. Nesse trabalho empregamos o formalismo do pseudopotencial não local, na teoria do funcional densidade, e a Dinâmica de Car e Parrinello para estudar a adsorção de Te sobre o InAs crescido ao longo da direção [001], para estudar as propriedades eletrônicas resultantes desta adsorção.

PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE AEROGÉIS DE NIÓBIA

RABÊLO, A.; BOZANO, D. DE F.; FLORENTINO, A.; AEGERTER, M.

Instituto de Física e Química de São Carlos - IFQSC

O nióbio é um importante constituinte em catalisadores heterogêneos, agindo como componente cataliticamente ativo ou como promotor em formulações multicomponentes. Dentre os compostos de nióbio, o pentóxido é o mais utilizado, por ser mais barato, de fácil obtenção e apresenta propriedades Físico-Químicas que permitem sua utilização em catálise ácida. Um gel de nióbia (Nb_2O_5) foi preparado pela hidrólise e condensação do pentabutoxido de nióbio e subsequentemente secado por extração supercrítica com dióxido de carbono, para produzir o respectivo aerogel. As propriedades texturais e estruturais deste aerogel (em função da temperatura) foram caracterizadas pelas medidas de área superficial, porosidade, difratometria de raios-X e MEV. Os resultados foram comparados com os resultados obtidos para o Nb_2O_5 comercial (CBMM). Notou-se que a rota de síntese proposta (via aerogel) permite obter aerogéis com área superficial (BET) de aproximadamente $180 \text{ m}^2/\text{g}$ para temperatura de calcinação de

773K e possibilita estabilizar termicamente (em pelo menos 150°C) as propriedades texturais e estruturais do Nb_2O_5 . >

CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA EM SUPERFÍCIES METÁLICAS MAGNÉTICAS USANDO O RS-LMTO-ASA

PEDUTO, P. R.; FROTA-PESSÔA, S.

Instituto de Física - USP

Desenvolvemos^[1] o *RS-LMTO-ASA* ("Real-Space-Linear Muffin Tin Orbitals in the Atomic Sphere Approximation") baseado no formalismo LMTO-ASA^[2] e implementado no espaço real.

Este método se mostrou extremamente eficaz no estudo de estrutura eletrônica de sistemas complexos tais como sistemas amorfos, impurezas em metais, sistemas magnéticos, complexo de vacâncias^[3] etc.

Neste trabalho, propomos uma versão do método para o estudo de sistemas com simetria bidimensionais dentre os quais destacamos superfícies metálicas magnéticas. Como aplicação exibiremos alguns resultados de primeiros princípios para uma monocamada de Fe sobre uma superfície de Cu FCC e compararemos estes resultados com os obtidos usando-se métodos usuais de espaço recíproco.

[1] Peduto P.R., Frota-Pessôa S., Methfessel M. - Phys. Rev. B 44, 13283 (1991).

[2] Andersen O.K., Jepsen O. - Phys. Rev. Lett 53, 2571 (1984).

[3] S.Frota-Pessôa et al - Phys. Rev. B 71, 4206 (1993).

SURFACE PLASMONS RESSONANCE EM FILMES IMPLANTADOS

LIBARDI, H.; GRIENEISEN, H. P.

UFRGS

Neste trabalho utilizamos o método de "Surface Plasmons Ressonance" (SPR) na caracterização das constantes ópticas de materiais alterados com implantação iônica. A implantação de íons modifica o índice de refração dos materiais ópticos, principalmente devido a mudanças estruturais internas nos materiais. O método SPR envolve mudanças na densidade superficial de carga ao longo de uma interface dielétrico/metal e sua ressonância com uma onda evanescente induzida por reflexão interna total em um prisma acoplador. A ressonância consiste no casamento da componente superficial do vetor de onda incidente com o vetor de onda do plasmon de superfície e pode ser observada variando-se o ângulo de incidência de um feixe laser de frequência fixa ou variando-se a frequência do laser incidindo em um ângulo fixo. Tal efeito depende das constantes dielétricas do metal e do dielétrico na vizinhança da

interface e é sensível a pequenas variações nas propriedades ópticas do filme. Com o auxílio de um prisma, acoplamos o feixe laser a um filme multicamadas de Criolita (Na_3AlF_6) e Prata (Ag) e estudamos as mudanças ocorridas nas propriedades ópticas do filme implantado com íons de gases nobres.

Estado desmagnetizado e magnetostricção em multicamadas Co/Pd

VIEGAS, A. DA C.; SCHELP, L. F.; CARARA, M. A.; SCHMIDT, J. E.

IF - UFRGS

O estudo das curvas de magnetostricção da multicamada Co-Pd permitem obter informação da distribuição de magnetização no estado desmagnetizado. As multicamadas foram caracterizadas estruturalmente por difração de raios x evidenciando uma textura hcp com eixo c perpendicular ao plano da amostra e orientação aleatória no plano do filme. A morfologia das curvas de magnetostricção para campos aplicados nas direções transversal e longitudinal à direção da medida são dependentes da relação de espessuras $\frac{t_{Co}}{t_{Pd}}$. Para espessuras onde o eixo fácil está perpendicular ao plano, as curvas longitudinal e transversal apresentam valores de saturação de mesmo sinal. Isto é observado para $t_{Co} = 4 \text{ \AA}$ à 15 \AA para $t_{Pd} = 15 \text{ \AA}$. Para $t_{Co} > 15 \text{ \AA}$ as curvas longitudinal e transversal saturam com valores opostos (definidos a partir de um estado desmagnetizado). Das considerações estruturais citadas obteve-se a expressão da magnetostricção de saturação mediante uma média das deformações de policristais hexagonais com eixos c orientados, obtendo-se a dependência observada, ou seja as constantes de magnetostricção resultantes tem o mesmo sinal.

Formation Parameters and Crystalline Control of TiN Thin Films.

CHUBACI, J. F. D.; WATANABE, S.; MATSUOKA, M.

Laboratório de Dosimetria, Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

SAKAI, T.; YAMAMOTO, T.

Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University, Osaka, Japan.

NISHIYAMA, S.; EBE, A.; OGATA, K.

R&D Div., Nissin Electric Co. Ltd., Kyoto, Japan

FUJIMOTO, F.

Okayama University of Sciences, Okayama, Japan

TiN thin films have been formed on silicon wafers by the ion and vapor deposition (IVD) method. The ion implantation energy varied from 2.0 to 8.0 keV and the measured composition ratio (Ti/N) varied from 1.06 to 1.79. The crystalline orientations were studied by X-ray diffraction, the composition ratio by X-ray induced photoelectron spectroscopy (XPS) and the Vickers hardness was also analyzed. The ion implantation ef-

fect was evaluated by Monte Carlo simulations using the TRIM code. For a same energy, samples, with a composition ratio approaching stoichiometry, were preferentially oriented in the direction of the (200) axis of titanium nitride, while when the composition ratio departed from stoichiometry there was a tendency for polycrystallization with the presence of the (111), (200) and/or (220) axis. For samples with a composition ratio close to stoichiometry, the intensity of the (200) reflection plane had a tendency to increase for lower energies and to decrease for higher energies. Samples with a higher crystalline orientation showed to be harder than those polycrystalline. The Monte Carlo simulations indicated that for samples with same composition ratio, the ions' energy loss at low energies had a higher contribution from phonons than from ionization while at higher energies the ionization effect increased. The radiation damage increase was very small compared to that of ionization and phonons. For a same energy and increasing composition ratio, the ions' energy loss was similar to that of increasing ions' energy. It can be concluded that the variation on the ionization and phonon levels of the ions' energy loss is the determinant parameter on the crystalline control. (JFDC partially supported by CNPQ).

SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA A PROBABILIDADE DE IONIZAÇÃO: UMA ANÁLISE CRÍTICA

DACAL, L. C. O.; CASTILHO, C. M. C. DE
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia
ANDRADE NETO, A. V. DE

Universidade Estadual de Feira de Santana

A determinação das taxas de ionização por campo, como ocorrem no Microscópio Iônico de Campo (Field Ion Microscope -FIM) torna-se difícil por duas razões: a dificuldade de estabelecer um modelo adequado que reflita a variação local do campo elétrico e a solução da barreira de potencial. A segunda dificuldade leva a que mais facilmente se adote uma solução numérica para a mesma. A expressão analítica até recentemente usada era a de Haydock e Kingham (HK) /1/. Recentemente /2/ uma crítica à expressão de HK foi apresentada mas que continua a assumir o campo elétrico como constante. Neste trabalho discutimos os vários aspectos envolvidos nas expressões apresentadas nas referências 1 e 2, comentando também sobre que modificações podem ser incluídas no sentido de tornar mais realista o cálculo das taxas de ionização.

/1/ R. Haydock e D. R. Kingham, Surface Science, v. 103, 239 (1981). /2/ S. C. Lam e R. J. Needs, Surface Science, v. 277, 359 (1992).

**ESTAÇÃO EXPERIMENTAL DE
ESPECTROSCOPIA DE NÍVEIS
PROFUNDOS (XAS E XPS) PARA O
LABORATÓRIO NACIONAL DE LUZ
SÍNCROTRON**

TOLENTINO, H.; VICENTIN, F.; ZANCHET, D.;
ABBATE, M.

*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq, Campinas,
SP*

O objetivo principal é a realização de pesquisa sobre a estrutura geométrica e as propriedades eletrônicas e magnéticas em compostos de metais de transição e terras raras através de espectroscopia absorção de níveis profundos (XAS e XPS). O conhecimento da relação entre a estrutura geométrica e as propriedades eletrônicas e/ou magnéticas de qualquer material é fundamental e as espectroscopias de níveis profundos são ferramentas importantíssimas na busca desse conhecimento. Os principais projetos a serem desenvolvidos estão ligados às propriedades estruturais e eletrônicas de óxidos de metais de transição (supercondutores, semicondutores, etc...) e filmes finos e sanduíches metálicos (metais de transição e terras raras). Além destes projetos locais, existem uma série de projetos de outras instituições ligados a problemas de superfície (IF-USP, SP), oxidação de metais e semicondutores (Conicet, Argentina) e físico-química (FQ-UFRJ, RJ). Para a realização das experiências será construída no LNLS uma linha de luz que cobrirá a região de raios X desde 800 até 12000 eV. Esta linha de luz será composta, a partir da fonte de luz, de um "front-end", que serve de sistema de proteção ao anel, fazendo a interface entre a estação experimental propriamente dita, de uma óptica, que serve para guiar, monocromatizar e definir geometricamente o feixe de luz, e de uma câmara de ultra-alto vácuo, onde a amostra será analisada e, eventualmente também preparada "in situ". Esta linha será instalada em uma saída de um ímã dipolar do anel UVX/LNLS, cujo espectro de emissão de luz está otimizado para a região de raios X moles - energia crítica de 1230 eV (10 Å). Esta linha de luz poderá também servir a espectroscopia de fotoelétrons, sendo que o componente a mais necessário, um analisador de energia dos elétrons, já está sendo adquirido. Pretendemos ter esta linha experimental implantada até o final do ano de 1994, que coincidirá com a conclusão da fonte de luz UVX/LNLS.

**ESTUDO DA DESSORÇÃO DE ÍONS DE
HIDROGÊNIO INDUZIDA PELO IMPACTO
DE PROJÉTEIS RÁPIDOS DE CARBONO
EM FENILALANINA**

LEITE FILHO, C. V. DE B.; SILVEIRA, E. F. DA;
PINHO, R. R.; MOURA FILHO, J. J. DE; BAPTISTA,
G. B.

*Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro,
PUC-Rio*

A descrição dos mecanismos responsáveis pela des-sorção de íons de hidrogênio é um problema que apresenta vários aspectos interessantes na descrição da interação íon-superfície. Além dos processos que ocorrem como consequência da energia depositada pelo projétil no interior da amostra (mecanismo cinético), a des-sorção dos íons H^+ e H_2^+ depende também fortemente do estado de carga com que o projétil incide na amostra (mecanismo de superfície). Neste trabalho apresentamos o resultado de um estudo sistemático de des-sorção de íons de hidrogênio por feixes de carbono (C^q , $q = -1, 0, +1a + 6$) com energias entre 300 keV e 5 MeV incidindo em fenilalanina ($M = 165u$). Os feixes foram produzidos pelo acelerador Van de Graaff de 4 MV da PUC-Rio. Os resultados sugerem três possíveis interpretações para o mecanismo cinético. Na primeira, a des-sorção dos íons de hidrogênio resulta de processos em que a energia cedida pelo projétil aos elétrons da amostra é depositada em sua totalidade até a profundidade em que o estado de carga médio do projétil é igual ao estado de carga com que ele incide na amostra. Na segunda, a des-sorção dos íons de hidrogênio resulta de um processo cuja origem está relacionada com o número de ionizações primárias por unidade de comprimento (dJ/dx), produzidas ao longo de toda a trajetória do projétil na amostra. Na terceira, a des-sorção dos íons H^+ e H_2^+ resulta das colisões entre o projétil e as moléculas da amostra. Com relação ao mecanismo de superfície, para os íons H^+ e H_2^+ , os resultados sugerem uma abordagem por um modelo de pré-impacto, enquanto que no caso do íon H^- , processos adicionais podem ocorrer.

**ESTUDO DA CINÉTICA DE
AMORFIZAÇÃO ATRAVÉS DE MEDIDAS
DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA *IN SITU*
EM FILMES FINOS IRRADIADOS COM
ÍONS**

MIRANDA, R. M. N.; VASCONCELLOS, M. A. Z.;
BAIBICH, M. N.; AMARAL, L.; SCHERER, C.

Instituto de Física, UFGRS

COSTA, J. A. T. B. DA

UFSM

A amorfização de filmes finos pode ser obtida entre outros métodos pela irradiação de íons de gases nobres. Como este processo induz danos de forma controlada, mostra-se bastante adequado em estudo da cinética de amorfização, sobretudo quando medidas de resistividade elétrica *in situ* podem ser feitas de modo contínuo acompanhando o controle da dose de irradiação. Neste trabalho as amostras, confeccionadas na evaporadora Balzer-UMS, são do tipo $(Ni_{50A}^{\circ}/Al_{75A}^{\circ})_n$ onde n varia de 2 a 6, produzindo assim espessuras totais variando de 25 a 75 nm, com a camada inicial de Al depositada sobre SiO_2 . A seguir homogeneizadas através de tratamento

térmico a 823K durante 1h. Estas amostras foram irradiadas a 77K com íons de Ar^+ com energia de 100keV e dose entre $1\text{E}15$ e $3\text{E}15$ íons/ cm^2 . As medidas de resistividade elétrica foram realizadas *in situ* e durante o processo de irradiação, através da técnica de 4 pontas com sensibilidade de 1 ppm em sistema controlado por computador. Os resultados obtidos da resistividade elétrica são descritos numa abordagem cinética em termos dos volumes da fração amorfa em função da dose de irradiação. Isto nos permite propor um mecanismo dominante no processo de modificação da estrutura dos filmes relacionando com parâmetros da cascata de colisões.

Germânio Amorfo Nitrogenado: Análise por XPS

LANDERS, R.; ZANATTA, A. R.; CHAMBOULEYRON, I.; DECASTRO, S. C.; KLEIMAN, G. G.
IFGW-UNICAMP

Apresentamos medidas de XPS (Espectroscopia de Fotóeletrons Excitados por Raio-X) realizadas em amostras de Ge amorfo nitrogenado, com a concentração de N variando de 0 a 31%. A análise das linhas fotoelétricas 3d e das Auger $\text{L}_{3\text{M}_{4,5}\text{M}_{4,5}}$ indica a presença de mais de uma espécie de Ge. Usando um modelo proposto para Si nitrogenado, interpretamos essas espécies como associadas a átomos de Ge para os quais as ligações Ge-Ge foram substituídas por outras Ge-N. Verificamos, assim, pela evolução da intensidade de cada tipo de Ge, que à medida que o teor de N aumenta, há predominância de Ge ligado a um maior número de átomos de N. Medindo os deslocamentos de energia de ligação do Ge 3d e de energia cinética da transição $\text{L}_{3\text{M}_{4,5}\text{M}_{4,5}}$, calculamos o parâmetro Auger para cada espécie de Ge, a partir do Ge sem N. A variação desse parâmetro, definida como o negativo da soma dos deslocamentos de energia da linha 3d mais os deslocamentos da linha Auger $\text{L}_{3\text{M}_{4,5}\text{M}_{4,5}}$, indica que quanto maior a concentração de N, mais isolante deve ser o material.

Uso da difração de fotoeletrons de raios-x (XPD) na determinação da geometria de adsorção de moléculas simples em superfícies metálicas cristalinas

CARVALHO, A. V. DE
UFMG
WOODRUFF, D. P.
University of Warwick

A orientação de moléculas como CH_3S - e CH_3O - adsorvidas em superfícies metálicas cristalinas tem sido objeto de diversos estudos e controversias. Tal informação pode fornecer indicações sobre o tipo de ligação entre a molécula e o substrato. Resultados de NEXAFS indicam eixo molecular C-S ou C-O inclinado em relação à superfície mas espectroscopia de reflexão - adsorção de infravermelho (RAIS) de CH_3O em $\text{Cu}(111)$, difração de fotoeletrons com varredura em energia de CH_3O em $\text{Cu}(100)$ e SEXAFS de CH_3S em $\text{Cu}(111)$ indicam orientação perpendicular à superfície. A difração de fotoeletrons de raios-x com varredura angular (XPD) explora o fato de que a energias cinéticas suficientemente altas (tipicamente maiores que 500eV), elétrons são espalhados por átomos principalmente na direção para a frente e com diferenças de fase pequenas bastante para assegurar interferência construtiva. Este efeito é explorado em XPD para identificar as direções da ligação molecular entre vizinhos mais próximos em relação à superfície cristalina através de picos na distribuição angular dos elétrons emitidos de níveis profundos dos átomos mais próximos à superfície. Nossos resultados de XPD para adsorção de CH_3S e CH_3O em $\text{Cu}(111)$ mostram claramente eixo perpendicular à superfície. Resultados preliminares com a mesma técnica, para elucidar a antecipada adsorção ("atop") de átomos alcalinos Cs e K em $\text{Cu}(111)$ confirmam tal geometria de adsorção que é polêmica. Neste caso, no entanto, efeitos de espalhamento dentro do substrato complicam a interpretação dos dados, mas, argumentos de simetria reforçam a identificação da adsorção ("atop") em ambos sistemas.

Fotoemissão: Heterojunções e Superfícies (SUF, SEM, MMM) -
09/06/94

Semiconductor Heterojunctions and Schottky Barriers: New Experiments and New Concepts

MARGARITONDO, G.

Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale PH-Ecublens, CH-1015 Lausanne, Switzerland

The physics of semiconductor interfaces is undergoing a revision of several accepted concepts, a revision which is forced by a number of new experimental results. The starting point of this evolution, approximately two years

ago, was the reconciliation of the three classic theories of semiconductor interfaces: the defect model, the midgap-energy model and the classic Schottky model. A truly universal approach appeared able to account for all of the experimental data – until the arrival of the aforementioned new results. For example, it had been assumed that a limit Schottky-like case can be reached by eliminating all other factors that can affect the interface Fermi-level position, notably in the case of layered semiconductors. Recent experiments, however, have shown that even the "simplest" cases of Schottky-like interfaces are not simple at all, so that there is at present no known case of truly Schottky-like behavior. Furthermore, the advances in spectromicroscopy have finally re-opened the old question about the lateral variations of semiconductor interface energy barriers. Specific experiments have almost invariably shown that the concept of heterojunction band discontinuity and Schottky barrier must be critically revised, becoming a local rather than non-local interface property. The only notable exception so far has been Sb on GaAs, which Pianetta et al. have shown to actually decrease the lateral variations of the band bending of the cleaved substrate. And there is an even deeper issue that is raised by the new results: that of low-dimensionality, which could certainly affect semiconductor interfaces and other semiconductor-related systems. It has been found that fundamental phenomena such as the photoelectric effect are strongly affected by low-dimensionality, in such a way that even the definition of the metallic or semiconducting character might require a critical revision. In the limit case, one could even question Landau's conceptual framework of the Fermi liquid, since many of the "new" phenomena could be conceivably explained by elementary excitations other than "holes".

PHOTOELECTRON DIFFRACTION OR PHOTOELECTRON HOLOGRAPHY? - QUANTITATIVE ADSORBATE STRUCTURE DETERMINATION AT SURFACES

WOODRUFF, D. P.

Physics Department, University of Warwick, Coventry CV4 7AL, UK

The determination of the local adsorption structure adopted by adsorbed atoms and molecular species on well-characterised single crystal surfaces is a key prerequisite for understanding the electronic and chemical properties of surfaces. Small molecular species, especially those containing mainly the light elements C, N and O, are of particular importance in understanding the mechanisms of heterogeneous catalysis at metal surfaces, but commonly do not form the long-range ordered structures required for conventional diffraction techniques. One technique which has been shown to be applicable to such problems is photoelectron diffraction; the method relies on the same coherent interference of elastic scattering events which underpin conventional electron diffraction methods, but by making one the adsorbed atoms become the electron source, elemental and chemically specified *local* structural information is available. One alternative view of this process is to regard it as photoelectron holography; the interference pattern involves a 'reference wave' (the unscattered photoelectron wavefield) and waves scattered off an 'object' (the surrounding atoms), so in principal computational hologram inversion could provide an 'image' of the surface. Such an inversion would provide a *direct* method of structure determination.

In this review the basic physics of photoelectron diffraction and the conventional indirect 'trial and error' methodology for the determination of a range of adsorbate structures will be described. In addition, some successful direct methods of data analysis which are not truly holographic in nature, but utilise Fourier and similar transforms of experimental data, will be described. Some comments will be made concerning the problems of exploiting true photoelectron holography. All of the basic ideas will be illustrated by a number of specific examples relating to adsorption structures of increasing complexity.

Filmes Finos: Multicamadas, Efeito de Feixe de Íons (SUF) – 09/06/94

UMA ANÁLISE MÖSSBAUER DO CRESCIMENTO PLANAR NA REAÇÃO DE ESTADO SÓLIDO EM FILMES FINOS

PAESANO JR, A.

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Parana

TEIXEIRA, S. R.; AMARAL, L.

Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS

Quando filmes constituídos pela deposição alternada de elementos A e B são submetidos a tratamento térmico, pode ocorrer a formação de fases (p. ex.: $A_\beta B$, $A_\alpha B$, etc) que reagem nas interfaces das camadas depositadas. Este processo denomina-se Reação de Estado Sólido (RES) em multicamadas. Eventualmente, o crescimento das camadas reagidas ocorre planarmente. Um dos modelos teóricos que descrevem o crescimento planar de fases foi proposto por Gösele e Tu*. Neste mo-

delo são obtidas expressões para a velocidade de crescimento das camadas reagidas em função de parâmetros de difusão e reação. No presente trabalho adaptamos o modelo de Gösele e Tu a situações que são freqüentemente verificadas em casos reais de RES em multicamadas mas que não foram tratadas originalmente por Gösele e Tu. Resultados experimentais de espectroscopia Mössbauer, relativos a multicamadas de Fe-Zr tratadas termicamente são confrontados e analisados à luz do modelo adaptado.

*U.Gösele and K.N.Tu, *J. Appl. Phys.*, 66 (1989) 2619 e *J. Appl. Phys.* 53 (1982) 3252.

CARACTERIZAÇÃO E ASPECTOS TERMODINÂMICOS DE FASES EM MULTICAMADAS DE Fe/Zr MISTURADAS POR FEIXE DE ÍONS DE Xe.

TIMM, C. A.; AMARAL, L.

Instituto de Física, UFRGS

O crescimento planar de fases amorfas/cristalinas estáveis ou metaestáveis ocorre em filmes finos de metais de transição. Este trabalho estuda nucleação de fases, mecanismos de difusão e termodinâmica da mistura para multicamadas de Fe/Zr quando irradiada com feixe de íons. Amostras foram preparadas pela evaporação sequencial de Fe e Zr em substrato oxidado. Para uma mesma composição nominal de Fe_{0,50}Zr_{0,50} e mesma espessura total de 900 Å obtivemos três amostras com as seguintes geometrias (n° de vezes (espessura da camada de Fe/espessura da camada de Zr)): amostra A - 6 x (50 Å Fe/100 Å Zr); amostra B - 3 x (100 Å Fe/200 Å Zr); e amostra C - 10 x (30 Å Fe/60 Å Zr). Estas amostras foram misturadas com implantação de íons de Xe ($5 \times 10^{13} \leq \phi \leq 10^{15}$ Xe/cm², energia de 600 keV). Através das técnicas de retroespalhamento de Rutherford (RBS) e espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS) foram identificadas as fases formadas sob implantação e medidas as quantidades de fases formadas em função de espessura e dose. Estes resultados são discutidos em termos de cinética e termodinâmica de sistemas metaestáveis, bem como em termos de um diagrama de energia livre de Gibbs proposto para este sistema.

Comparação de Filmes Finos Depositados por IBAD para Proteção Contra Corrosão com Filmes depositados por Outras Técnicas.

HÜBLER, R.

PUCRS - UFRGS

Nas últimas duas décadas, a deposição de filmes finos pela técnica de IBAD (Ion Beam Assisted Deposition) tornou-se uma alternativa para obter recobrimentos protetivos de alta qualidade. Porém, as vantagens e desvantagens da IBAD em relação a outras técnicas de deposição ainda são questionadas. Neste trabalho

será feita uma comparação das propriedades protetoras frente a corrosão e desgaste mecânico de filmes finos de nitreto de titânio depositados por IBAD, Ion Plating e magnetron Sputtering. Serão comparados os resultados de microdureza dos filmes finos usando um microdurômetro controlado por computador marca Fischerscope. A capacidade protetora frente a corrosão será avaliada por estudos de voltamografia cíclica. Os resultados serão discutidos em função das variações na microestrutura dos filmes induzida pelas diferentes técnicas de deposição.

DIELÉTRICOS DE ALTA CONDUTIVIDADE IÔNICA IRRADIADOS POR ÍONS ENERGÉTICOS

PAULA, C. A. DE; D'AJELLO, P. C. T.

UFSC

Desenvolvemos estudos das β'' -Aluminas irradiadas por íons de argônio a 200 KeV. A direção de incidência coincide com o eixo cristalográfico c. Assumimos que as amostras permanecem a temperatura de 300 K durante a irradiação. Considerando coeficientes de difusão, mobilidade e campo elétrico dependentes de posição obtemos os perfis de concentração do elemento alcalino (Na) que desenvolve uma difusão assistida por campo elétrico com "sputtering" preferencial na superfície. Verificamos a forte dependência desses perfis com a variação temporal das constantes difusivas. Diversas situações são exploradas de maneira a permitir inferir quais os fatores relevantes na determinação da forma do campo elétrico. Uma argumentação física para justificar o surgimento desse campo em dielétricos irradiados é apresentada. Incorporamos os efeitos da alteração sistemática da composição do material irradiado na determinação do coeficiente de difusão dos íons alcalinos. Os resultados teóricos são comparados aos dados experimentais.

EFEITOS DA IMPLANTAÇÃO DE GASES NOBRES EM AÇOS CARBONO NITRETADOS A PLASMA.

SIMON, G.; LUFT, C. A.; VASCONCELLOS, M. A. Z.;

SANTOS, C. A. DOS

Instituto de Física - UFRGS

Em trabalhos anteriores de implantação iônica de nitrogênio em aços, constatou-se que a irradiação por gases nobres aumenta a estabilidade dos nitretos formados. Neste trabalho utilizando-se as técnicas de CEMS (Espectroscopia Mössbauer de Elétron de Conversão), CXMS (Espectroscopia Mössbauer de Raio-X de Conversão) e de difração de raio-X a ângulo rasante, investigou-se o efeito da implantação de gases nobres (Ar e Kr) na camada de compostos formados por nitretação a plasma em aços carbono nitretados a diferentes tempos. Definiu-se as energias e doses para

os gases nobres de modo que o perfil implantado fosse um platô na região de 1000 Å a partir da superfície. Utilizou-se reação nuclear para confirmar o perfil de profundidade do nitrogênio nas amostras pré e pós implantadas. Verificou-se por raio-X que a irradiação praticamente não modificava a amostra, porém por CEMS observou-se um espectro significativamente diferente ao não implantado, com um aumento do número de sítios com campos na região de 200 KG, campos típicos de nitretos ϵ -Fe_{2+x}N. Verificou-se também que os nitretos formados após a implantação eram instáveis a 250°C, após o que se reestruturavam em nitretos estáveis até temperaturas da ordem de 400°C.

Filmes Finos (SUF) - 09/06/94

CINÉTICA DE FORMAÇÃO DOS NITRETOS DE FERRO EM PÓS-DESCARGA

SILVA SOBRINHO, A. S. DA; DRAGO, V.; SOUZA, A. R. DE

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Camadas finas (~ 300 nm) de nitretos de ferro são formadas sobre um substrato de aço SAE 1020 (0.2% Wt carbono) por nitretação em pós-descarga numa atmosfera de N₂ + traços (entre 40 e 180 ppm) de CH₄, sob pressão de 4 Torr em fluxo. Com o objetivo de estudar a cinética de formação destes nitretos variamos as temperaturas de tratamento de 400 C a 540 C e tempos de 15 min. a 60 min. As análises por espectroscopia Mössbauer (CEMS) mostram que a nitretação se inicia pela formação de aglomerados de fases metaestáveis identificadas como FeN e Fe_{1,6}N e que evoluem para a fase ξ -Fe₂N em temperaturas inferiores a 450 C. O espectro CEMS a temperatura ambiente da fase FeN apresenta apenas um singleto paramagnético com largura de linhas de apenas 0.24 mm/s e deslocamento isomérico IS = 0.047 mm/s, o que corresponde a um ambiente de coordenação tetraédrica para o átomo de ferro. Ela possui uma estrutura cúbica tipo ZnS com parâmetro de rede a=4.33 Å. Já a fase Fe_{1,6}N apresenta no espectro CEMS um dubleto paramagnético (QS ~ 1.31 mm/s e IS = 1.90 mm/s) de linhas muito alargadas, evidenciando vários ambientes de coordenação para o átomo de ferro. Não foi possível obtê-la isoladamente e a sua estrutura não foi determinada. Tratamentos térmicos mostraram que ela representa um estágio intermediário na evolução da fase FeN para a fase ξ -Fe₂N. Com resultados anteriormente realizados, conclui-se que a cinética de formação dos nitretos de ferro se dá através da evolução: FeN → Fe_{1+x}N → ξ -Fe₂N → ϵ -Fe₂₋₃N → γ' -Fe₄N,

onde $x < 1$, e cada etapa é acompanhada por evolução de nitrogênio.

OBTENÇÃO DE CARBETO DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO A PARTIR DE DESCARGA LUMINESCENTE A 60 Hz

FRAGALLI, J. F.

Departamento de Física - Campus de Bauru - UNESP
NAKAGAITO, A. N.; MISOGUTI, L.; RAMOS, L. R.;
BAGNATO, V. S.
IFQSQ, USP - São Carlos

Nós obtivemos filmes de carbeto de silício amorfo hidrogenado (a -Si_{1-x}C_x:H) com um reator de descarga luminescente tendo como gerador do plasma um transformador 0-3000 V a 60 Hz. Usualmente um gerador de rádio-frequência (RF) a 13.56 MHz é utilizado na obtenção de tais filmes. As condições nas quais estes filmes são preparados são: a) temperatura do substrato entre 150 e 200 C; b) pressão de deposição de 0.5 torr, com mistura de silana (SiH₄) e metano (CH₄) em diferentes pressões parciais; c) tensão no transformador de 450 V e corrente no plasma de 3 mA, indicando uma potência de 1.35 W. Resultados preliminares indicam que filmes de a -Si_{1-x}C_x:H com baixo teor de carbono apresentam significativa foto-sensibilidade, e à medida que mais carbono é incorporado mais resistivo torna-se o filme.

RECRISTALIZAÇÃO DE FILMES DE SILÍCIO AMORFO HIDROGENADO INDUZIDA POR LASER DE ARGÔNIO

RAMOS, L. R.; MISOGUTI, L.; NAKAGAITO, A. N.;
BAGNATO, V. S.
IFQSQ, USP - São Carlos
FRAGALLI, J. F.

Departamento de Física - Campus de Bauru - UNESP

Filmes de silício amorfo hidrogenado (a -Si:H) preparados por descarga luminescente a 60 Hz foram irradiados com laser de argônio (cw Ar⁺ laser) de alta intensidade. Duas regiões distintas são observadas no filme ao longo do raio do feixe incidente. No centro o filme apresenta-se quase transparente indicando um processo de recristalização acelerado. Em regiões periféricas o filme apresenta uma alteração em sua cor: inicialmente vermelho, após a incidência do laser o filme torna-se amarelo. A transição entre estas duas regiões é abrupta. A formação destas duas regiões está associada ao caráter gaussiano do feixe. A recristalização é fortemente dependente da temperatura local, que por sua vez é mais intensa no centro do feixe laser, onde sua intensidade é maior. Figuras de microscopia eletrônica de varredura (SEM) são mostradas, e medidas da transmiância do filme em cada região são realizadas.

PROGRAMA PARA REDUÇÃO DE DADOS, DO MÉTODO DE ENVELOPE, PARA FILMES FINOS.

DESTRO, M. A. F.; DAMIÃO, A. J.
CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

O método de envelope, para análise de espectros de transmissão de filmes finos, possibilita uma medida simultânea do índice de refração n_2 e do coeficiente de absorção κ_2 , para os comprimentos de onda onde o espectro apresenta pontos de máximo e mínimo. Possibilita também o cálculo da espessura t_2 dos filmes finos que: não absorvem ou apresentam pequena absorção ($\kappa_2 \rightarrow 0$), na região espectral utilizada. O espectro de transmissão obtido deve apresentar pelo menos três pontos de máximo e três pontos de mínimo. O filme deve estar depositado em substrato espesso o suficiente para não apresentar o fenômeno de interferência e deve ser transparente na região em que se obteve o espectro. Para analisar espectros de transmissão de filmes finos, utilizando o método de envelope, é necessário aplicar um método de interpolação aos pontos de máximo, para obter os correspondentes pontos de mínimo, e vice-versa. Para aplicar o método de envelope desenvolveu-se um programa em linguagem Turbo Pascal. O método de interpolação utilizado foi o parabólico passando por três pontos. O programa também está preparado para fornecer as constantes da equação de dispersão de Cauchy. Para executar o programa introduz-se os valores das transmitâncias máximas e mínimas com seus respectivos comprimentos de onda e o índice de refração do substrato. Obtem-se os possíveis valores de n_2 , κ_2 e t_2 nos comprimentos de onda dos pontos de máximo e mínimo e as constantes da equação de dispersão de Cauchy.

Serão apresentados: o fluxograma do programa e os resultados de medidas realizadas em filmes finos de PbF_2 . Estes resultados serão comparados com os resultados obtidos com as técnicas de Elipsometria e Modos Guiados.

ÍNDICE DE REFRAÇÃO DE CAMADA ANTI-REFLETORA INOMOGÊNEA POR FABRICAÇÃO.

DAMIÃO, A. J.

CTA/IEAv - São José dos Campos - SP

Existem dois processos principais de produção de uma camada inhomogênea para atuar como anti-refletora: 1) camada (filme fino) obtida por co-evaporação de dois materiais, e 2) ataque químico preferencial, com ou sem máscara, para obter a chamada Anti Reflection Structure Surface, ARS. A estrutura ARS é semelhante a um conjunto de pirâmides de base quadrada, dispostas simetricamente sobre um plano. Para estudar o comportamento desta estrutura foi adotado neste trabalho o modelo que aproxima cada pirâmide a uma pirâmide constituída de cubos. O período dessas pirâmides é uma

ordem de grandeza menor que o comprimento de onda utilizado.

O índice de refração efetivo de cada degrau da pirâmide de cubos é proporcional ao volume ocupado pelos cubos em relação ao volume total do degrau.

Utilizando o Macleod Thin Film Program foram calculadas as propriedades ópticas destas camadas para a altura de cada pirâmide variando entre 5 e 50 cubos, supondo que a espessura total esteja fixa em $1\mu\text{m}$.

A continuidade deste trabalho será obter as propriedades ópticas para comprimentos de onda da ordem do período dessas pirâmides.

MECANISMO DE CRESCIMENTO DA CAMADA DE COMPOSTOS EM AÇO 1010 NITRETADO A PLASMA.

SIMON, G.; LUFT, C. A.; VASCONCELLOS, M. A. Z.;
SANTOS, C. A. DOS
Instituto de Física - UFRGS

As propriedades mecânicas e tribológicas das camadas de compostos obtidas através de diferentes métodos de nitretação de aços têm sido bastante estudadas. Este trabalho tem por objetivo complementar estas pesquisas caracterizando a nível microscópico a formação e a estrutura desta camada. Amostras de aço carbono 1010 foram analisadas por Espectroscopia Mössbauer de Elétron de Conversão (CEMS), Espectroscopia Mössbauer de Raio-X de Conversão (CXMS) e por Difração de Raio-X a ângulo rasante. As amostras foram nitretadas a plasma em diferentes tempos de nitretação. O perfil de profundidade do nitrogênio foi estimado utilizando-se medidas de microdureza, reação nuclear $^{15}\text{N}(p, \gamma)^{16}\text{O}$ e fluorescência de raio-X através de micro-sonda. Constatou-se que a quantidade de nitretos γ' cresce em direção à superfície, com o aumento do tempo de nitretação; tal crescimento se dá às custas da diminuição da quantidade de nitretos ϵ , contrariando comportamento esperado. Acredita-se que o mecanismo responsável por este comportamento está relacionado com um processo de recozimento "dinâmico"; a elevação de temperatura provocada pelo bombardeio iônico proporciona a transformação dos nitretos ϵ em nitretos γ' .

ESTUDO SISTEMÁTICO SOBRE A FORMAÇÃO E A ESTABILIDADE TÉRMICA DA CAMADA DE COMPOSTOS EM AÇOS CARBONO NITRETADOS A PLASMA.

SIMON, G.; LUFT, C. A.; VASCONCELLOS, M. A. Z.;
SOARES, M. R. F.; SANTOS, C. A. DOS
Instituto de Física - UFRGS

Nitretação de aços é um assunto que vem despertando grande interesse há quase um século. Ao longo do

tempo, novas técnicas têm sido propostas na tentativa de aumentar a eficiência do processo. Recentemente tem-se dado bastante ênfase às modificações mecânicas e tribológicas causadas pela nitretação a plasma. Este trabalho tem por objetivo o estudo microscópico sistemático da formação e das características estruturais da camada de compostos obtidas por nitretação a plasma em aços carbono, bem como seu comportamento frente à implantação de gases nobres e ao tratamento térmico em vácuo. Foram utilizadas para análise das amostras as técnicas de CEMS (Espectroscopia Mössbauer de Elétron de Conversão), CXMS (Espectroscopia Mössbauer de Raio-X de Conversão) e difração de raio-X a ângulo rasante. Utilizou-se neste estudo aços carbono de diferentes concentrações de carbono (1010, 1020, 1035, 1038, 1045), tendo-se nitretado as amostras a tempos diferentes (15, 30, 60, 120, 240 min). Os gases nobres foram implantados com diferentes energias e diferentes doses, de modo a formar um platô de 1000 Å a partir da superfície da amostra. O estudo de estabilidade térmica foi feito através de recozimentos em vácuo, durante 1 hora, nas temperaturas de 250, 320, 400, 500 e 600 °C. Os resultados obtidos permitem, entre outras, as seguintes conclusões: (1) invariância da camada de compostos nas diferentes matrizes para um mesmo tempo de nitretação; (2) aumento da quantidade de nitreto γ' na superfície com o aumento do tempo de nitretação; (3) modificação da estabilidade térmica dos nitretos formados quando irradiados com gases nobres. Tais resultados serão comparados aqueles obtidos com a implantação de nitrogênio nos mesmos tipos de aços, e submetidos aos mesmos tratamentos térmicos e bombardeios iônicos.

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE DIAMANTE POR MICROSCOPIA ELETRÔNICA DE VARREDURA.

TRIPPE, S. C.; SALVADORI, M. C.

INSTITUTO DE FÍSICA, USP, SÃO PAULO

Foram realizadas deposições de diamante em substrato de silício policristalino com tratamento prévio da superfície de diversas formas. O método utilizado para a síntese de diamante foi o CVD a plasma de microondas, ou seja, deposição química a vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition). Os parâmetros fixados no equipamento foram: pressão: 80 mmHg; posição do substrato: 130 mm; fluxo de hidrogênio: 300 sccm; fluxo de metano: 1,50 sccm; temperatura: 856 graus celsius; tempo de deposição: 120 minutos. As preparações do substrato foram feitas através de vários métodos distintos a fim de poder discutir a forma de nucleação. Vejamos: (i) método clássico, polimento do substrato com pó de diamante; (ii) recobrimento do substrato com uma fina camada de grafite; (iii) substrato sem qualquer tipo de tratamento; (iv) substrato com pó de diamante espalhado por toda a superfície. As caracterizações foram

feitas usando microscopia eletrônica de varredura, onde se pode fazer um estudo da densidade de nucleação e do tamanho de grão.

SIMULAÇÃO DE ELETRODEPOSIÇÃO FRACTAL I: MODELO

SILVA, F. L. B. DA; SOUZA, A. R. DE

Universidade Estadual Paulista

SANTOS, L. M. DOS

Depto. de Física - FFCLRP-USP

O estudo dos fenômenos de crescimento por agregação de partículas é muito importante na Física, Química e na Engenharia. A eletrodeposição de metais tem fascinado eletroquímicos pela importância tecnológica destes, como por exemplo, a fabricação de baterias e a obtenção do Zinco. Os modelos utilizados para a simulação destes fenômenos derivam do desenvolvido por Witten-Sanders para a difusão limitada por agregação (DLA), sendo um exemplo o modelo de Sagués-Costa. O principal parâmetro destes é a probabilidade da partícula se agregar ou não a superfície (probabilidade de sticking), sendo geralmente um valor constante. Neste trabalho, modificamos o modelo de Sagués-Costa, redefinindo a probabilidade de sticking como uma função exponencial decrescente e mantemos a concentração do sistema constante. Os resultados obtidos concordam com a literatura e estão mais coerentes com a teoria da eletrodeposição.

Apoio: CNPq, FUNDUNESP

ESPECTROSCOPIA ÓPTICA DOS PLASMAS DE DEPOSIÇÃO DE FILMES DE SiO_x

CRUZ, N. C. DA; MARÇAL, N.; RANGEL, E. C.;

DURRANT, S. F.; MORAES, M. A. B. DE

Unicamp

Plasmas de tetrametilsilano [TMS, (CH₃)₄Si], O₂ e gases nobres (He ou Ar) foram empregados na preparação de filmes de óxido de silício não estequiométrico (SiO_x). As descargas foram geradas por campos de corrente contínua entre dois eletrodos paralelos numa câmara de vácuo. Empregou-se um espectrômetro óptico monocromador para caracterizar as descargas, sendo os filmes analisados por espectrofotometria infravermelha de transmissão (EIT). As espécies químicas H, C, Si, O, CH e CO foram identificadas na descarga e as variações relativas de suas concentrações determinadas em função da proporção de O₂ na mistura em descargas de TMS/O₂/He e TMS/O₂/Ar. As medidas mostram que para uma mesma proporção de O₂, as proporções relativas das espécies detectadas no plasma diferem drasticamente conforme He ou Ar é empregado na mistura, o que se reflete na composição e estrutura do filme. Observou-se uma forte correlação entre a concentração

das espécies CH e CO no plasma e as concentrações das ligações C-H e Si-O nos filmes determinadas por EIT. Possíveis mecanismos de formação das espécies químicas identificadas no plasma, reações entre elas e seu papel na formação do filme serão discutidos.

SISTEMA DIDÁTICO PARA A PRODUÇÃO DE FILMES FINOS METÁLICOS.

LIMA, W. M.

DFI/UEM

Este sistema foi projetado para pesquisa, desenvolvimento e produção de recobrimento metálicos, mas a sua função básica é o ensino. Esta unidade possui todos os controles fixos em um painel de instrumento e estes são facilmente selecionados e claramente visíveis. O sistema básico de bombeamento está montado em um móvel compacto com a base da câmara ergometricamente situada na sua parte superior a uma altura de fácil acesso. Esta unidade vem com uma eficiente bomba de difusão e uma armadilha para nitrogênio líquido e pode atingir nas condições normais pressões de 10^{-4} Torr. Cuidado tem sido tomado em assegurar a máxima segurança quando o sistema se encontra em operação. Uma válvula de vácuo facilita o acesso a câmara de evaporação e a todos os acessórios dispostos nela.

O PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO E A DESORDEM QUÍMICA EM FILMES DE ANTIMONETO DE GÁLIO AMORFO

SILVA, J. H. D. DA

Depto. de Física, Fac. de Ciências, Unesp - Bauru.

CISNEROS, J. I.; CARDOSO, L. P.

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp - Campinas.

Apresentamos brevemente um sistema de evaporação flash construído para a preparação de filmes semicondutores amorfos de compostos III-V, e os resultados de medidas ópticas elétricas, e de difração de raios-X, obtidos para um conjunto de filmes de GaSb. Foram estudadas, usando espectroscopia de fotoelétrons (XPS), as variações composicionais decorrentes das diferentes temperaturas de cadinho utilizadas durante cada deposição. Em consequência das variações composicionais observamos modificações na borda de absorção óptica e na condutividade elétrica contínua dos materiais. Estes resultados mostraram-se compatíveis com o aumento da desordem química (sítios com coordenação três ou ligações homopolares) à medida que a composição se afasta da estequiométrica. Uma seqüência de tratamentos térmicos a temperaturas crescentes primeiramente produziu variações detectáveis na borda de absorção óptica e nas propriedades vibracionais do GaSb. Estas variações são atribuídas a um maior ordenamento local na estrutura do GaSb segundo observado nos espec-

tros de espalhamento Raman e de absorção no infravermelho. Tratamentos térmicos a temperaturas maiores provocam a cristalização parcial do material conforme indicado pelos padrões de difração de raios-X. Os nossos resultados experimentais e os modelos de estrutura eletrônica encontrados na literatura para os semicondutores amorfos do tipo III-V indicam que o mecanismo de cristalização é baseado na migração e posterior segregação dos excessos de Sb das regiões cristalizadas para as regiões amorfas intersticiais.

Síntese de Diamante a partir de grafite usando o processo de CVD a plasma de microondas

MAMMANA, V. P.; SALVADORI, M. C.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

É bastante conhecido o método de crescimento de diamante, em diversos tipos de substratos, utilizando a deposição química a vapor por plasma de microondas (CVD - Chemical Vapor Deposition). No processo usual de deposição utiliza-se hidrogênio misturado ao metano, este último em concentrações inferiores a 1%. Tal processo, realizado em equipamento construído em nosso laboratório, vem demonstrando bons resultados. É sabido que o hidrogênio atômico presente no plasma promove corrosão do grafite (ligações sp^2), ao mesmo tempo que não interfere nas ligações que caracterizam o diamante (ligações sp^3). A idéia deste trabalho é a obtenção de diamante exclusivamente a partir do carbono proveniente da corrosão de grafite por plasma de hidrogênio. Colocando grafite em pó proximamente à amostra, na região do plasma, e inserindo apenas hidrogênio dentro da câmara de reação, obtiveram-se cristais isolados de diamante sobre silício policristalino, estes cristais com tamanhos da ordem de 10 a 40 μm .

CRESCIMENTO DE FILMES METÁLICOS SOBRE FILMES DE CaF_2 DEPOSITADOS SOBRE SILÍCIO MONOCRISTALINO

MATTOSO FILHO, N. P.; MOSCA, D. H.

Laboratório de Materiais do DF - UFPR

MAZZARO, I.

Laboratório de Ótica de Raios-X e Instrumentação do DF - UFPR

SCHREINER, W. H.; TEIXEIRA, S. R.

Laboratório de Filmes Finos do IF - UFRGS

O crescimento de filmes metálicos epitaxiais sobre silício monocristalino é bem conhecido, assim como o crescimento de filmes epitaxiais de Fluorita (CaF_2) sobre o mesmo monocristal, os quais possuem propriedades isolantes e passivadoras. No entanto, há muito a ser investigado com relação ao crescimento de filmes metálicos sobre camadas epitaxiais de CaF_2 crescidas sobre silício monocristalino. Neste trabalho apresentamos os nossos primeiros resultados dos filmes de Cu e Fe depositados sobre camadas altamente orientadas de CaF_2 , que

por sua vez foram crescidas sobre substratos de Si(111). Os filmes foram depositados numa evaporadora Balzers UMS 500P à pressões de 10^{-8} mbar, sendo que os filmes de CaF_2 (400 Å) foram depositados à temperatura de substrato de 300°C sofrendo um posterior tratamento térmico rápido "in situ". A temperatura gerada pelo "flash" foi de 600°C durante um intervalo de 1 minuto. Em seguida filmes metálicos de Cu e de Fe, ambos com 300 Å, além de multicamadas de Cu(15 Å) e Fe(15 Å) repetidas 10 vezes, foram depositados sem qualquer aquecimento intencional do substrato e sem que tenha ocorrido a quebra do vácuo. As amostras foram analisadas por técnicas de difração de raios-x e a verificação da existência de epitaxia foi realizada com análises de microscopia eletrônica de transmissão.

POLIMENTO DE FILMES DE DIAMANTE

PENA †, A. F. V.

UNESP-FCT- Presidente Prudente

CORAT, E. J.; TRAVA-AIROLDI, V. J.; LEITE, N. F.

LAS/INPE

Após constatação da obtenção de diamante pelo processo de Deposição Química da Fase Vapor (CVD), um grande esforço começou a se constituir em busca de possíveis aplicações do diamante em filmes finos e espessos, aproveitando suas propriedades únicas na natureza, particularmente, a combinação destas propriedades faz com que seja o material ideal para muitas aplicações ópticas. O diamante puro é caracterizado por uma banda larga de transparência, o que pode também ser alcançado com o diamante CVD, para isto deve-se obter filmes de granulometria pequena, com o controle dos diversos parâmetros de crescimento. Adicionalmente, deve-se diminuir a rugosidade através de polimento da superfície do filme. Neste trabalho, filmes de diamante CVD foram polidos em vácuo e com injeção de gás apropriado, usando um disco aquecido de ferro (cerca de 800°C) como agente polidor. Foi utilizada Microscopia Eletrônica de Varredura para estudar o grau e qualidade do polimento e Espectroscopia Raman para análise da qualidade do diamante. Parâmetros de polimento como temperatura e velocidade de giro do diamante em relação ao disco de ferro foram estudados em função da qualidade do polimento do filme.

†Bolsa RHAÉ

FILMES DE DIAMANTE DEPOSITADOS SOBRE FERRAMENTAS DE CORTE DE WC/Co

SALVADORI, M. C.; MIYAO, Y.; MOSCATI, G.
INSTITUTO DE FÍSICA, USP, SÃO PAULO

Através de deposição química a vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition) é possível se recobrir com diamante superfícies de uma vasta gama de materiais, alterando-se significativamente suas propriedades

físicas e químicas. O recobrimento de ferramentas de corte de WC/Co (metal duro) com filmes de diamante prolonga sensivelmente seu tempo de vida. Uma limitação para estas ferramentas é a impossibilidade de serem utilizadas par usinagem de materiais ferrosos, sendo adequadas para se trabalhar com outros metais, cerâmica, madeira etc. Duas grandes dificuldades são encontradas em deposições de diamante sobre WC/Co: o coeficiente de dilatação térmica do metal duro é bem maior que o do filme de diamante, o que gera tensões entre filme e substrato, desde que a deposição é realizada entre 800 e 900°C (faixa de temperatura ideal para crescimento de diamante); outra dificuldade está no fato do cobalto inibir a nucleação de diamante, criando uma interface contendo grafite, o que compromete a adesão entre filme e substrato. As ferramentas utilizadas neste trabalho foram pastilhas para torno compostas por 97% de WC e 3% de Co, o que corresponde a uma baixa concentração de cobalto, minimizando as dificuldades apresentadas acima. O critério de avaliação dos resultados foi considerar o tempo de vida da ferramenta em uso, monitorando periodicamente através de observação morfológica por microscopia eletrônica de varredura.

Este projeto tem apoio FAPESP.

ESTUDO DE FASES AMORFAS EM LIGAS Fe-Sc.

RODRÍGUEZ, V. P.; PASSAMANI, E. C.;
BAGGIO-SAITOVITCH, E.; XIA, S. K.
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Neste trabalho reportamos a preparação de ligas amorfas $\text{Fe}_x\text{Sc}_{1-x}$ obtidas pela técnica de congelamento de vapor (CV). Para comparação nós também preparamos ligas amorfas por moagem mecânica (MM) a partir de soluções sólidas da liga cristalina $\text{Fe}_x\text{Sc}_{1-x}$. As propriedades destas ligas são muito sensíveis às condições de preparação das amostras. Através de CV, pode-se preparar ligas em sistemas imiscíveis e por (MM) pode-se estudar uma transição de uma fase cristalina a uma fase amorfa. Aqui nós apresentamos estudos "in situ" do efeito Mössbauer do ^{57}Fe em ligas $\text{Fe}_x\text{Sc}_{1-x}$ ($0.04 < x < 0.98$) preparadas por CV num amplo intervalo de temperatura com a finalidade de caracterizar a simetria local dos ions de Fe e as propriedades magnéticas nestes sistemas. Com a finalidade de estudar a instabilidade do sistema, nós usamos medidas Mössbauer "ex situ" à temperatura ambiente e hélio para determinar o efeito do tempo. Também foram estudados efeitos de "annealing" com variação de temperatura controlada de alguns filmes.

FILMES DE $\text{Sn}_x\text{Cr}_{1-x}$ PREPARADOS POR CONGELAMENTO DO VAPOR

PASSAMANI, E. C.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.
CBPF

No diagrama de fase de equilíbrio, a solubilidade entre Sn e Cr é praticamente desprezível. Entretanto, usando o método de Congelamento do Vapor (CV) preparamos a solução sólida, em forma de filmes finos, em todo o intervalo de composição. Os filmes de $\text{Sn}_x\text{Cr}_{1-x}$ são preparados evaporando os metais em dois fornos resistivos independentes e mantendo o substrato de kapton à 300 K. A espectroscopia Mössbauer do ^{119}Sn , foi utilizada para o estudo das interações hiperfinas nos sítios dos átomos de Sn. Nos espectros Mössbauer, os picos referentes ao óxido e/ou metal de Sn estão ausentes, sugerindo a formação de uma solução sólida. À 4.2 K, os espectros Mössbauer para os filmes com alta concentração de Sn, $50 < x < 95$, podem ser analisadas considerando uma componente quadrupolar cujo deslocamento isomérico (DI) é 2.65 mm/s com respeito ao óxido de Sn, valor este do estanho metálico. Por outro lado, para os filmes com $x < 30$ os espectros Mössbauer apresentam uma linha única alargada, indicando uma interação magnética que é proveniente do campo transferido dos átomos de Cr.

DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS DE MATERIAIS REFRAATÓRIOS POR MAGNETRON SPUTTERING

ROLIM, A. L. V. S.; AGUIAR, J. A.; SILVA JR, E.
F. DA

Departamento de Física - UFPE

Metais refratários (*Ti, W, Mo, Ta*) são de grande importância para a fabricação de estruturas e dispositivos semicondutores com dimensões submicrométricas. Apesar de seu papel fundamental para o bom funcionamento de uma grande variedade de circuitos integrados largamente comercializados, muitas propriedades físicas e microscópicas de filmes finos destes materiais ainda não são bem compreendidas e necessitam melhores estudos. Neste trabalho utilizamos a técnica de deposição por Magnetron Sputtering para produzir filmes finos de *Ti, W, Mo, Ta* depositados em substratos semicondutores (silício) e dielétricos (vidros) com espessuras dos filmes na faixa de 0-500nm. A deposição por Magnetron Sputtering RF e DC é estudada variando-se parâmetros tais como a potência RF e DC (0-500W), a separação alvo-substrato e a pressão do plasma de Ar ($10^{-1} - 10^{-3}$ torr). Os resultados apresentados compararam as diferenças nas taxas de deposição, e determinam pontos ótimos de trabalho para a obtenção de filmes refratários de alta qualidade. A análise das propriedades físicas dos filmes é realizada através de medidas de "grau de granulação" (TEM) e medidas de stress induzido sob os substratos. Os resultados obtidos serão

utilizados em etapas de processo para a fabricação de dispositivos microeletrônicos.

Trabalho financiado pelo CNPq e FINEP.

INTERBAND TRANSITION STRENGTH AND MAGNETO-ABSORPTION SPECTRUM IN TYPE I SUPERLATTICES ON IN-PLANE MAGNETIC FIELDS.

GONDAR, J. L.; COSTA, B. DA; DICKSTEIN, F.
Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

The not well understood case of high in-plane magnetic field effects on Type I Superlattices (magnetic length comparable with the Superlattice period) is studied theoretically. In previous experimental works on $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Superlattices it was found that, with increasing fields, clear-cut interband transitions start broadening and then begin to disappear. To our knowledge, this effect is still unexplained. It is known that the magneto-optical transition matrix elements can be used to interpret the absorption spectra. In our theoretical study we found strong variations of these transition strengths, as a function of the cyclotron orbit center position, which are related to such a broadening an final saturation of the magneto- absorption spectrum. We explain this effect on the basis of magnetic subbands mixing with increasing fields, using perturbation theory for quasi-degenerate states. Our numerical calculations of the magneto- optical absorption spectrum in the presence of high in-plane magnetic fields reproduce, qualitatively, the above mentioned experimental results.

INTERAÇÕES PLASMA SUPERFÍCIE E PRECURSORES DE FORMAÇÃO DE FILMES EM DESCARGAS DE MISTURAS DE C_2H_2 , N_2 E GASES NOBRES.

RANGEL, E. C.; MARÇAL, N.; CRUZ, N. C. DA;
DURRANT, S. F.; MORAES, M. A. B. DE
Instituto de Física. Unicamp.

Plasmas de descargas luminescentes de misturas de acetileno (C_2H_2), N_2 e gases nobres (He e Ar) foram empregados para a deposição de filmes de polímero. As descargas foram produzidas por um gerador de rf (40 Mhz, 100 W) entre dois eletrodos paralelos numa câmara de vácuo metálica equipada com uma janela de quartzo. Espectroscopia óptica de emissão foi utilizada para a análise do plasma por meio de um espectrômetro monocromador de alta resolução. Para a análise dos filmes foi empregada espectrofotometria infravermelha de transmissão. Várias espécies químicas como H, CH e CN foram detectadas na descarga. Medidas de infravermelho mostraram que a concentração das ligações C-H e N-H nos filmes aumenta com o aumento das concentrações das espécies CH e CN no plasma, o que sugere

que as duas últimas sejam precursores de formação do filme. Enquanto H e CH são produtos de fragmentação de C_2H_2 devido ao impacto de elétrons da descarga, a espécie CN tem sua origem em processos bem mais complicados: detecta-se claramente a banda de emissão CN após a deposição do polímero nitrogenado, mesmo quando o C_2H_2 é subtraído da descarga. Isto indica fortemente que a espécie CN é emitida pela superfície do polímero devido a ação das partículas energéticas do plasma. Experiências realizadas com plasmas de N_2 , He e Ar, a serem discutidas, indicam fortemente que as espécies meta-estáveis do plasma, ao se deexcitarem na superfície do polímero, cedem energia à cadeia carbônica resultando em quebra de ligações e emissão de espécies CN.

FILMES ANTI-REFLETORES PARA O LiF

LEME, D. G.; MITANI, S. E.

Comissão Nacional de Energia Nuclear - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - São Paulo

Os "coatings" anti-refletores são utilizados para diminuir a refletividade nas superfícies dos componentes óticos. Em geral são coatings de uma a quatro camadas, dependendo do índice de refração do substrato e da refletividade final desejada. No Laboratório de Filmes Finos do IPEN foram desenvolvidos filmes anti-refletores para o LiF (índice de refração de 1,38 para 1060 nm) em consequência da necessidade interna do grupo de obtenção destes para serem utilizados nos lasers de centros de cor desenvolvidos em nosso laboratório. Para deposição dos filmes, os cristais de $LiF : F^{2-}$ devem ser mantidos a temperatura ambiente, pois com o aquecimento há um decaimento da concentração do centro F^{2-} . O programa de computação desenvolvido em nosso laboratório foi utilizado para auxiliar na escolha dos materiais a serem evaporados e determinação da espessura dos filmes para o ângulo de incidência normal. Os materiais ZnS , $MgF_2 + 5\%BaF_2$, $MgF_2 + 2,5\%CaF_2$, Na_3AlF_6 e CeF_3 , utilizados em diferentes combinações e espessuras, foram depositados em vidro e cristais de LiF. Os filmes foram caracterizados medindo-se o espectro de transmissão com o espectrofotômetro Cary 17D. Após a deposição os cristais de LiF foram testados como chaveador passivo para lasers de Nd, resistindo intensidades de pulsos da ordem de Mw/cm^2 e também serão utilizados no laser sintonizável de $LiF : F^{2-}$.

Cinética de crescimento da formação de silicetos Ni_2Si a baixa temperatura

LOSCH, W.

COPPE-UFRJ

A taxa de crescimento de filmes finos de silicetos depende da orientação do substrato Si (hkl). Sugere-

se um mecanismo para esta dependência baseado na existência de uma rede de discordâncias formada na interface Ni/Si logo no início da deposição do filme metálico. A formação desta rede é provocada pelo descasamento da rede cristalina dos dois materiais Ni e Si. Supondo que a rede de discordâncias dá origem aos contornos de grão no siliceto e que o mecanismo de difusão seja dominado pela difusão através destes contornos, calcula-se a taxa de crescimento dos filmes de Ni_2Si para temperaturas de tratamento térmico T ; 300 °C. Os valores calculados para a espessura dos filmes são da mesma ordem de grandeza dos obtidos experimentalmente.

CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE 30%IrO₂+70%TiO₂ PREPARADOS EM DIFERENTES TEMPERATURAS POR MICROSCOPIA ELETRÔNICA DE VARREDURA

SILVA, L. A. DA; ALVES, V. A.

Univ. de São Paulo - Ribeirão Preto

SILVA, M. DE A. P. DA; AEGERTER, M. A.

Univ. de São Paulo - São Carlos

Filmes de óxidos condutores de composição nominal $Ir_{0,3}Ti_{0,7}O_2$ e espessura de $2\mu m$ foram preparados a partir do pincelamento e posterior decomposição térmica das misturas dos cloretos precursores sobre um suporte de Ti metálico, compondo os ânodos dimensionalmente estáveis, ADE, destinados principalmente à produção comercial de cloro e soda. Os ADEs foram preparados em quatro diferentes temperaturas de calcinação: 350, 400, 450 e 500°C, com o objetivo de investigar por microscopia eletrônica de varredura, MEV, a influência deste parâmetro na morfologia destes filmes, visto que mesma é de grande importância para prever o seu desempenho eletrocatalítico. As micrografias da superfície destes ânodos revelou uma estrutura do tipo "barro-rachado", característica destes filmes formados termicamente, para os eletrodos preparados a 350, 400 e 450°C. A 500°C o filme adquire uma estrutura "rugosa". Observou-se também que, conforme a temperatura aumenta, o filme formado é mais compacto, o que é consistente, uma vez que ocorre uma maior sinterização do filme de óxidos.

Filmes Finos Envolvendo Semicondutores Amorfo e Cristalinos (SUF) - 10/06/94

DETERMINATION OF ACTIVATION ENERGY FOR DIAMOND GROWTH WITH CF₄ ADDITION IN HFCVD.

CORAT, E. J.; TRAVA-AIROLDI, V. J.; LEITE, N. F.
LAS/INPE

PENA†, A. F. V.

UNESP-FCT- Presidente Prudente

BARANAUSKAS, V.

FEE/UNICAMP

In this work we show that the addition of a small amount of CF₄ in a regular CH₄-H₂ gas mixture allows diamond growth at lower temperatures with reasonable growth rates. We used a hot filament assisted reactor and observed diamond growth with a substrate temperature as low as 250°C. Raman Spectroscopy, SEM and AFM images show the good quality of the films grown at low temperatures when CF₄ is added in the feeding gas. The growth rate was measured by post growth weighting with a micro balance. The resolution was enough to measure growth rates in the range of 0.1 μm/h. We measured an activation energy of around 11Kcal/mol for diamond growth as a dependence on substrate temperature. This value is around half the activation energy for growth with the regular mixture. This result shows that the introduction of fluorine chemistry is a possible way to grow diamond at low temperatures.

†Bolsa RHAE

TENSÃO INTERNA EM FILMES DUROS DE a-C:H INCORPORADOS COM SILÍCIO

BAIA NETO, A. L.; SANTOS, R. A.; ARGO JR, S. C.
COPPE-UFRJ

FREIRE JR, F. L.

PUC - RJ - Instituto de Física

Filmes duros de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) do tipo diamante possuem inúmeras aplicações em potencial devido as suas interessantes propriedades, como: alta dureza, estabilidade química, baixo coeficiente de atrito, alta condutividade térmica, baixa condutividade elétrica, etc. No entanto, estes filmes apresentam altas tensões internas que limitam sua adesão a diversos tipos de substratos e a máxima espessura com que podem ser produzidos. Neste trabalho, obtivemos filmes duros de a-C:H incorporados com silício (a-C_{1-x}Si_x:H; 0 ≤ x ≤ 0.6) com tensão interna reduzida e dureza inalterada. Nossos resultados mostram que a incorporação de pequenas quantidades de silício (~ 0.1 at.%) produz uma diminuição considerável da tensão

interna, mostrando que alterações estruturais devem estar ocorrendo, mesmo a baixas concentrações. Medidas de ERHD mostram que a concentração total de hidrogênio é pouco alterada pela incorporação de silício, enquanto a espectroscopia IV indica uma baixa densidade de ligações Si-H. Experimentos de efusão de hidrogênio mostram um deslocamento do pico para altas temperaturas, relacionado a uma mudança na microestrutura do material, a medida que silício é incorporado. Por outro lado, tratamentos térmicos a temperaturas abaixo da do máximo do pico de efusão permitem obter uma redução adicional da tensão interna destes filmes, ao contrário do que ocorre em filmes puros de a-C:H. Estes resultados experimentais serão discutidos a luz dos modelos existentes.

ANÁLISE ESTRUTURAL DE FILMES DE NITRETO DE CARBONO AMORFO COM ESPECTROSCOPIA RAMAN, ANIQUILAÇÃO DE POSITRONS E EFUSÃO.

FREIRE JR, F. L.

Departamento de Física - PUC-Rio

ACHETE, C. A.

PEMM-COPPE/UFRJ

BRUSA, R. S.; ZECA, A.; MARIOTTO, G.

Dipartimento di Fisica, Università di Trento

Apresentamos resultados da distribuição de microporos em filmes de carbono amorfo hidrogenado e nitretos de carbono hidrogenados (a-C:H e a-CN_x:H, respectivamente) obtida com espectroscopia de aniquilação de positrons-efeito Doppler. Os filmes são depositados por PECVD a partir de um plasma de metano e nitrogênio. Esses resultados são discutidos juntamente com os obtidos por Raman e evolução térmica de gases. A notável redução da tensão interna de filmes de nitreto de carbono observada para diferentes concentrações de nitrogênio é explicada como sendo devida ao aumento da concentração de microporos nestes filmes. Filmes de a-C:H depositados com diferentes tensões de polarização (V_b) apresentam uma redução da densidade de microporos com o aumento de V_b: nestes casos a redução da tensão interna dos filmes é devida à sua progressiva grafitização, como pode ser determinado pela análise Raman.

RECRISTALIZAÇÃO EPITAXIAL DE FASE SÓLIDA EM SILÍCIO AMORFO IMPLANTADO COM Fe.

SOUZA, J. P. DE; AMARAL, L.

Instituto de Física, UFRGS

FIGHTNER, P. F. P.

Escola de Engenharia, UFRGS

O crescimento epitaxial via fase sólida de Silício amorfo implantado com Ferro foi analisado através da técnica

de canalização retroespalhada de Rutherford (RBS). A investigação abrangeu o estudo da dependência da recristalização como função: i) da orientação do substrato de Si $\langle 100 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$; ii) da dose de Fe implantado ($10^{15} \leq \phi \leq 8 \times 10^{15}$ Fe/cm² - 100 keV); iii) e temperatura de recozimento (500 - 1000°C). Foi demonstrado que a presença de átomos de Fe na interface amorfo-cristalina afeta significativamente a cinética de recristalização e que os átomos de Fe são arrastados por esta frente de recristalização. Estes resultados são discutidos em termos da difusividade e solubilidade do sistema Fe/Si e dos modelos de recristalização. Também foi demonstrado que repetir sucessivamente oito vezes o passo (implantação de 10^{15} Fe/cm² seguido de recozimento 600°C/10 min), resulta em acumular todo o Fe numa região próxima a superfície ($\leq 150\text{Å}$), o que não ocorre se o processo for feito com uma única dose de implantação (8×10^{15} Fe/cm²) seguida de recozimento na mesma temperatura e tempo.

ESTRUTURA CRISTALINA DE FILMES FINOS EPITAXIAIS Cu CRESCIDOS SOBRE Si

MOSCA JR, D. H.

Laboratório de Materiais do DF - UFPR

MAZZARO, I.

Laboratório de Ótica de Raios-X e Instrumentação do DF - UFPR

SCHREINER, W. H.

Laboratório de Filmes Finos do IF - UFRGS

Neste trabalho investigamos a estrutura cristalina de filmes epitaxiais de Cu crescidos por evaporação por feixe eletrônico em equipamento Balzers UMS 500P com pressão de base de 2×10^{-8} mbar. A análise de raios-x utilizando a técnica de difração com varredura $\theta - 2\theta$ revela que para taxas de deposição inferiores a 30Å/s ocorre somente um pico de difração associado aos planos de Cu cfc(111) ou Cu cfc(100) conforme o substrato usado seja Si(111) ou Si(100). A espessura e homogeneidade dos filmes foram monitoradas através da análise das franjas de Kiessig em medidas de reflexão total. A análise dos planos de Cu (111) e Cu(100) usando difração com varredura ω revela a existência de larguras de linha de 5 a 10 vezes maiores do que as larguras de linha previstas para um monocristal de Cu com a mesma espessura. Medidas de difração assimétrica com incidência rasante revela que nos filmes de Cu sobre Si(100) a rede do Cu encontra-se girada de 30° em relação a rede do Si. Um ângulo de aproximadamente 2° de desorientação e um campo de tensões nos filmes de Cu levemente assimétrico (5%) entre a direção [100] e a direção [110] são apontados como responsáveis pelo alargamento das linhas observado na varredura ω . Nos filmes de Cu sobre Si(111) a rede do Cu encontra-se girada de 45° em relação a rede do Si; isto é, a relação epitaxial encontrada é Cu(110) // Si(211).

Dependência da Orientação Cristalina do Substrato na Síntese do $\beta - FeSi_2$

SAUL, C. K.; AMARAL, L.; SCHREINER, W. H.

Instituto de Física - UFRGS

O interesse no desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos integrados diretamente sobre silício provocou um aumento considerável na pesquisa do $\beta - FeSi_2$, que apresenta um gap óptico direto de 0,87 eV e possui elevado potencial de aplicação em comunicação por fibras ópticas com eficiência ótima em $1,4\mu m$. As multicamadas $12 \times [(9\text{Å de Fe} / 30\text{Å de Si})]$ foram depositadas simultaneamente sobre substratos de Si[111] e Si[100] em um equipamento BALZERS UMS 500P com uma taxa de $0,5 \text{Å/s}$ e pressão de base de 10^{-8} mbar. Posteriormente estas amostras foram submetidas a tratamentos térmicos à 400, 600 e 800°C durante duas horas sob vácuo de 10^{-6} mbar. A avaliação da influência da orientação cristalina do substrato foi efetuada utilizando Difração de Raios-X (XRD) e espectroscopia Mössbauer de Conversão de Elétrons (CEMS). Também foi efetuada a avaliação das características eletrônicas do siliceto obtido utilizando-se medição de resistividade em baixas temperaturas. As técnicas XRD e CEMS evidenciam claramente a existência de uma influência da orientação cristalina do substrato durante a evolução do $\beta - FeSi_2$ com o tratamento térmico. Já a medição de resistividade indicou que o siliceto obtido somente apresenta características semicondutoras em temperaturas inferiores a $-4,79^\circ C$, provavelmente devido à existência de níveis de impurezas e de defeitos.

EVOLUÇÃO DA TEXTURA DE SUPERFÍCIES ATACADAS FOTOELETRQUIMICAMENTE

FERREIRA, N. G.

ICET - UNIVAP - S. J. dos Campos - SP

CESCATO, L.

IFGW - UNICAMP - Campinas - SP

A evolução da textura superficial de amostras de n-InP (100) atacadas fotoeletroquimicamente foi investigada variando-se o tempo de ataque mantendo a corrente e a iluminação constante. Este tipo de ataque apresenta características fortemente anisotrópicas expondo os planos cristalinos de menor reatividade (111), formado homogeneamente por átomos de índio. A textura desenvolvida na superfície é formada por microburacos alongados cujos perfis variam segundo as duas direções ortogonais de clivagem (011) e (011). A evolução destes perfis foi analisada utilizando-se microscopia de varredura eletrônica (SEM), medidas de espalhamento total integrado e retroespalhamento. A medida que a textura se desenvolve o alongamento das microestruturas aumenta, adquirindo a superfície um caráter quase-periódico. Esta textura é acompanhada de uma mu-

dança no aspecto e na refletividade das amostras. A superfície evolui de um espelho passando por um estágio de difusor até atingir um estágio antirefletor. Nesta situação a textura se comporta como uma camada antirefletora com possibilidades interessantes para aplicação em dispositivos fotovoltaicos. As condições para se obter a mínima refletividade da superfície são discutidas.

Física de Superfícies II (SUF) -
10/06/94

**ESTUDO DA DESSORÇÃO IÔNICA
INDUZIDA PELO IMPACTO DE
PROJÉTEIS RÁPIDOS DE CARBONO EM
FENILALANINA**

PINHO, R. R.; SILVEIRA, E. F. DA; MOURA FILHO, J. J. D.; LEITE FILHO, C. V. DE B.; BAPTISTA, G. B.

*Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro,
PUC-Rio*

A descrição dos mecanismos responsáveis pela des-sorção iônica induzida por projéteis rápidos é um problema complexo e que não está ainda completamente resolvido. A maioria dos modelos utiliza na sua descrição a perda de energia eletrônica da partícula $(dE/dx)_e$ no material, como parâmetro. No entanto, não há uma relação única entre os rendimentos de des-sorção e o $(dE/dx)_e$ em diferentes regiões de energia e para diferentes combinações projéteis-superfícies. No presente trabalho apresentamos o resultado de um estudo sistemático com feixes de carbono (C^q , $q = -1, 0, +1a+6$) com energias entre 300 keV e 5 MeV incidindo em fenilalanina ($M \approx 165u$). Os feixes foram produzidos pelo acelerador Van de Graaff de 4 MV da PUC-Rio. A análise dos íons des-sorvidos foi realizada com o uso da espectrometria de massa por tempo-de-vôo. Os íons analisados foram 73^+ , 120^+ , 166^+ , 26^- e 164^- . Os resultados dos íons H^+ , H_2^+ e H^- são utilizados neste trabalho apenas para comparação. Os resultados sugerem duas possíveis interpretações. Uma delas está relacionada com o $(dE/dx)_e$, de forma que toda a energia cedida aos elétrons do material pelo projétil, até uma determinada profundidade na amostra, contribui para a des-sorção. A outra interpretação está relacionada com a taxa de ionização primária (dJ/dx) , de forma que a des-sorção resulta de um processo relacionado com o número de ionizações primárias por unidade de comprimento, produzidas ao longo de toda a trajetória do projétil na amostra.

**ELÉTRONS CONFINADOS EM CANAIS
UNIDIMENSIONAIS SOBRE UMA
SUPERFÍCIE DE HÉLIO**

CESAR, S. L.

UECE

FARIAS, G. DE A.

UFC

STUDART, N.

UFSCAR

Um filme de Hélio depositado numa rede de difração ótica, confina os elétrons sobre sua superfície em canais unidimensionais. Não levando em conta efeitos de interação elétron-elétron, a função de onda de um elétron neste sistema pode ser considerada como um produto de uma onda plana por uma função gaussiana. Os efeitos da interação elétron-ripplon e deste confinamento, considerado parabólico, sobre o estado fundamental de um elétron, são calculados usando teoria de perturbação. Particularmente calculamos a energia do estado fundamental e a massa efetiva do elétron neste sistema, como função de um campo elétrico perpendicular à superfície plana do filme de Hélio e um parâmetro que descreve o confinamento parabólico. Observamos uma mudança significativa das propriedades deste sistema e obtemos o limite de validade do método.

**SPECTRUM OF COLLECTIVE
OSCILLATIONS OF ONE-DIMENSIONAL
ELECTRON SYSTEM OVER LIQUID**

HELIUM

SOKOLOV, S. S.

UFSCar

KIRICHEK, O. I.

Academy of Science of Ukraine, Kharkov

The dispersion law of collective modes of one-dimensional electron chain into the channel filled by liquid helium is calculated theoretically. The dispersion law is shown to contain two branches. One of them is optical mode with threshold frequency depending on holding electric field. The group velocity of oscillations related to this mode is negative. The second branch is close to acoustical mode in the long-wave limit. The conditions of stability of the system are investigated. It is shown that one-dimensional chain of electrons into the channel of semispherical form on the liquid helium surface can loose its stability when the square of the frequency of optical mode becomes negative. The criterium of the stability of the system under consideration, which depends on the channel curvature radius and holding electric field, is established. The expression for dispersion law is obtained in the presence of magnetic field parallel to holding field. It is shown that in the limits of high holding field or high magnetic field the dispersion of optical mode disappeared practically.

At the same time the dispersion law of quasi-acoustical mode does not change qualitatively though it can change quantitatively.

Movimento de uma Linha de Contacto sobre uma Superfície Desordenada.

CRUZ, H. R. DA

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas
ROBBINS, M. O.

Department of Physics and Astronomy The Johns Hopkins University Baltimore MD 21218

Calculamos a dinâmica da linha de contacto entre um líquido e um gás numa placa heterogênea, que avança a uma velocidade constante v . Resultados analíticos anteriores para arranjos periódicos de heterogeneidades suaves, ou seja, sem discontinuidades, encontraram regimes de "pinning" fraco e forte. Obteve-se que a força média na linha de contacto que cresce com v^x , com $x = 2/3$. Nossa simulação numérica para um arranjo periódico de heterogeneidades Gaussianas reproduz este resultado para o expoente x e provê um critério para o limiar entre os regimes de "pinning" fraco e forte. O valor experimental de $x \simeq 0.4$ é bem menor que $2/3$. Acredita-se que isto seja devido a fenômenos críticos no início do movimento. Apresentaremos resultados de simulação numérica para uma superfície com heterogeneidades aleatórias que examina este comportamento crítico.

POS-IONIZAÇÃO DE ÁTOMOS EVAPORADOS POR CAMPO

CASTILHO, C. M. C. DE

Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

A evaporação controlada de camadas atômicas é o mecanismo básico no funcionamento do FIM-Atom Probe, equipamento capaz de fornecer um perfil de profundidade, em escala atômica, de uma amostra, usualmente metálica. Os átomos são usualmente removidos na forma de íons que, a uma distância da ordem de angstroms da amostra, podem ser adicionalmente ionizados pela ação do campo elétrico externo. A este fenômeno denomina-se de pós-ionização. Na evaporação de vidros

metálicos com impurezas foi observado que a proporção de íons das impurezas que sofreram ionização adicional diferia de uma forma isotópica para outra. Neste trabalho consideramos a presença de impurezas como N, Li, P, C e os efeitos do campo sobre a probabilidade total de ionização como função da massa dos vários isótopos, segundo o modelo de Menand e Kingham)/1/. /1/ A. Menand e D. R. Kingham, J. Phys. D: Appl. Phys. v. 17, 203 (1984)

OPTICAL MULTISTABILITY OF THIN FERROELECTRIC FILMS

CARRIÇO, A. S.

UFRN

A phenomenological theory for the optical multistability of second order thin ferroelectric films is presented. The model is based in a Landau-Devonshire expansion for the free energy from which the temperature and applied field dependences of the index of refraction are derived. The transmissivity is calculated for a ferroelectric thin film exposed to a plane polarized radiation field incident perpendicularly to the film surface. Free surface boundary conditions are considered and the near surface region in the ferroelectric is supposed to be free of space charge. The solution to the nonlinear differential equations for the field inside the ferroelectric is obtained from implicit relations involving elliptic functions which are solved using an iterative procedure which consists in the search of a single parameter in a finite interval. It is shown that near the Curie point (T_c) strong nonlinear effects are present in the transmitted power, even for modest values of the incident radiation field strength (E) compared to the coercive field. The evolution of the multistability pattern, as the transition temperature is approached, is in qualitative agreement with existing experimental results. The transmissivity is a multivalued function of the incident radiation field strength, for a given temperature, and as T_c is approached there is a marked decrease in the value of E to produce nonlinear effects.

CONFERÊNCIAS

Palestra Vespertina - A - 08/06/94

LASERS IN MEDICINE

JACQUES, S. L.; JACQUES, S.

Director, Laser Biology Research Laboratory, University of Texas M. D. Anderson Cancer Center 1515 Holcombe Blvd.

The use of lasers in medicine covers both DIAGNOSTIC and THERAPEUTIC applications. Diagnostic applications include spectroscopy and imaging. Therapeutic applications involve three mechanisms of laser-tissue interaction: photochemical, photothermal, and photomechanical.

DIAGNOSTIC applications include:

- (1) SPECTROSCOPY: Remote sensing of sites within the body can use optical fibers for reflectance and fluorescence spectroscopy. Spectroscopic signatures constitute a noninvasive "optical biopsy" which characterizes tissue without requiring physical removal of a sample.
- (2) IMAGING: Light can be used to image tumors, blood vessels, and other objects within turbid tissues. Time-domain and frequency-domain measurements are under development to improve imaging capabilities over that obtained by steady-state optical measurements. Pulsed-laser heating of vascular lesions of the skin allows imaging of lesions by time-resolved detection of infrared radiation from the skin. Photoacoustic imaging uses pressure waves which are induced in absorbing tissue structures by Q-switched laser pulses and detected with piezoelectric transducers.

THERAPEUTIC applications include:

- (1) PHOTOCHEMICAL: One example is Photodynamic therapy in which a photosensitive chemical agent is administered or induced in the body. The agent preferentially concentrates in tumors and subsequent light exposure activates the agent to produce radicals that kill the tumor. Another example is photochemical tissue "welding", in which light-activated cross-linking agents bond together two pieces of tissues.
- (2) PHOTOTHERMAL: Controlled photocoagulation involves the thermal denaturation and coagulation of tissue. Treatments of glaucoma, benign prostate hyperplasia, liver tumor nodules, and vascular lesions are examples of photocoagulation in medicine.
- (3) PHOTOMECHANICAL: The ability of lasers to cut, remove, or disrupt tissue involves the mechanical consequences of high energy densities in tissues. Traditional applications have used high power continuous lasers such as the CO_2 and Nd:YAG lasers to cut tissue or vaporize tumors. Currently, pulsed lasers such as excimer, erbium:YSGG, alexandrite, and others, are being used to reshape the cornea of the eye, drill teeth, break kidney stones, drill holes in ova for artificial insemination, remove pigmented skin lesions, remove tattoos, and achieve microsurgery. The combination of continuous and repetitively pulsed lasers is being developed to provide high average power with repetitive photomechanical effects, which achieves a controllable balance between efficient cutting and effective hemostasis (control of bleeding). Delivery of pulsed lasers through microscopes can achieve microsurgery and micromanipulation (the so-called "optical tweezers" effect).

The biological response to laser effects is an important aspect of therapeutic applications. Often the tissue response to injury is the principal effect sought, and the primary laser effect is simply a stimulus. Understanding the biological component is a critical aspect of laser-tissue interactions.

Palestra Vespertina - B - 08/06/94

Flux Lattice Melting in High-Temperature Superconductors: Some Novel Approaches*

STROUD, D. G.

Department of Physics, Ohio State University

In most high- T_c superconductors, the Abrikosov flux lattice melts at a temperature $T_c(H)$ well below the mean-field transition temperature $T_{MF}(H)$. This talk will present some recent numerical studies of flux lattice melting in high- T_c superconductors, and some experimental predictions. In this approach, the superconducting order parameter is expanded in basis functions which are products of states from the lowest Landau level in the ab plane, and

Bloch states in the c direction. This expansion is especially suitable for highly anisotropic superconductors, such as most of the CuO_2 -based materials. The expansion coefficients enter a Ginzburg-Landau free energy functional which is treated by standard Monte Carlo techniques. The resulting melting curves are in excellent agreement with experiment in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ over a broad field range. We also discuss the behavior of the superfluid density tensor (equivalent to the inverse kinetic inductance tensor). In the absence of pinning, the ab components of this tensor vanish with periodic boundary conditions, corresponding to the sliding freedom of the flux lattice in this geometry. Pinning produces a finite transverse superfluid density, which drops to zero at the melting temperature. I will also present recent numerical results on the behavior of the shear modulus of both two and three dimensional vortex lattices, and compare with theories which predict strong deviations from mean-field behavior, and, in 2D, a universal jump at melting. Finally, I will discuss melting induced by application of inhomogeneous currents in the so-called flux-transformer geometry in which current is applied in one layer while a voltage is observed in another layer. These calculations are based on an analog model in which the superconductor is represented as a three-dimensional arrangement of coupled Josephson junctions.

* Work carried out in collaboration with R. Šášík, W. Yu, and E. Roddick. I gratefully acknowledge support from NSF Grant DMR90-20994 and from the Midwest Superconductivity Consortium at Purdue University, through Department of Energy Grant DE-FG02-90ER-45427.

Palestra Vespertina - D - 08/06/94

Free Electron Lasers and Ultrabright Synchrotrons: New Avenues in Semiconductor and Interface Research

MARGARITONDO, G.

Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale PH-Ecublens, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Several events have recently revolutionized experimental interface science: the commissioning of the ultrabright synchrotron sources ELETTRA in Trieste, ALS in Berkeley and SRRC in Taiwan, and the initial operation of user-oriented free-electron laser (FEL) facilities at Vanderbilt and at the FOM in Holland. The superior performances of these photons sources open up an array of new opportunities. The specific example that we will discuss include: the detection of lateral changes in semiconductor interface barriers (heterojunction band discontinuities and Schottky barriers) by spatially-resolved photoemission; the discovery of local charging effects that forces a revision of the interpretation of most conventional core-level photoemission data on semiconductors and insulators; the optimization of surface chemical processes on a microscopic scale; the ultra-accurate measurements of interface barriers with the FEL-based FELIPE technique; two-photon absorption experiments in germanium and III-V's; ultrahigh-resolution studies of the superconducting gap with synchrotron-radiation photoemission. In each case, the experiments are the result of an evolution of already existing techniques, which in turn was made possible by the enhanced performances of the new facilities. Since we are at the beginning of the operation cycle of the new laboratories, it is easy to predict that new and even better results are forecoming: some predictions will be attempted by extrapolating the present trends in surface and interface science.

Palestras Vespertinas - C - 08/06/94

SCATTERING THEORY OF ELECTRICAL CONDUCTANCE: AN OVERVIEW

BÜTTIKER, M.

IBM T. J. Watson Res. Ctr., P. O. Box 218, Yorktown Heights, N. Y. 10598

Concern with mesoscopic conductors has led to renewed interest in the theory of electrical conductance. I present an overview of an approach which views the sample as a target which permits transmission and reflection of carriers. Scattering in the sample is elastic, irreversibility is introduced by assuming that carriers which leave the conductor never return. The experimentally relevant formulas for the dc-resistances of two and multi-terminal conductors are discussed. Illustrative examples are quantum point contacts, resonant tunneling and the quantized Hall effect. In this approach time-dependent fluctuations away from the average current occur because contacts at elevated temperature create fluctuating carrier populations of the incident states. In the presence of transport there is shot

noise which is non-zero even at zero temperature. The shot noise is a consequence of the availability of more than one final state in a scattering event. Therefore, the theory predicts zero shot noise for conductors in which carriers are either transmitted or reflected with a probability of one. More recently the approach has been extended to the case of time-dependent transport in the presence of oscillatory voltages applied to the contacts of the sample. The time-dependent transport requires detailed knowledge of the electric potential distribution inside the sample. A discussion of the admittance of the sample valid at small frequencies is presented. For an assembly of conductors in which at least one conductor has two or more contacts the theory predicts that capacitance coefficients exist which are not even functions of an applied magnetic field. Recent experiments by Wei and Smith which investigate such asymmetric capacitances are discussed.

M. Büttiker, H. Thomas and A. Prêtre *Phys. Lett.* **A180** 364, (1993).

M. Büttiker, *J. Phys. Condensed Matter* **5**, 9361, (1993).

AN ALGEBRAIC MODEL FOR THE EVOLUTION OF THE GENETIC CODE

HORNOS, J. E. M.; HORNOS, Y. M. M.

Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, C.P. 369, 13560-250, São Carlos, SP

A model for the evolution of the genetic code based in the idea the spontaneously broken symmetry is presented. The universal genetic code is compatible with the $Sp(6)$ symmetry broken into its maximal subgroups. The model indicates only six aminoacids in the begin of the evolution process.

Palestra Vespertina - A - 09/06/94

Magnetism and Superconductivity in Heavy-Electron Metals

OTT, H. R.

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH Hönggerberg, 8093 Zurich, Switzerland

In special rare-earth and actinide compounds, conduction electrons acquire extremely large effective masses which have to be traced back to magnetic degrees of freedom. In spite of the general tendency of suppression of magnetic order in these heavy-electron materials, magnetic order may occur out of a heavy-electron state and also, a heavy electron state may develop in the presence of a magnetically-ordered matrix. Recent microscopic experiments on materials of this type reveal that also in the absence of macroscopic indications of a cooperative phase transition, strong magnetic correlations exist, often involving only tiny ($< 10^{-1} \mu_B$) ordered moments. Experimental observations as a whole indicate that the heavy-electron state may not always be regarded as a simple Fermi-liquid state in the usual sense. Several interactions of similar strengths need to be considered. It appears that the balance of these interactions leads to electronic inhomogeneities in k-space. In other cases, experiments suggest magnetic inhomogeneities that are not simply due to spatial variations of the chemical composition. In some of these materials, a superconducting state involving the pairing of heavy electrons develops, usually at very low temperatures. Various experimental observations indicate that this superconducting ground state is characterized by an unconventional order parameter implying gap functions with unusual symmetries. This is supported by anomalous superconducting phase diagrams, giving evidence for different superconducting states, separated by distinct phase boundaries and by anomalous thermal- and transport properties of the superconducting state. Different examples of the various possibilities mentioned above will be presented and discussed.

Palestra Vespertina - B - 09/06/94

Recent Advances in High Resolution Laser Spectroscopy of Rare-Earth Ions in Solids

MACFARLANE, R. M.

IBM Almaden Research Laboratory, San Jose CA 95120

The spectroscopy of rare-earth ions in solids has a long history, but recent progress has been rapid because of the development of stable, tunable lasers and the application of a number of new techniques. These studies have provided many new insights into the fundamental interaction of coherent light with materials and rare-earth ions have additionally played an important role as probes of the local structure and dynamics of solids. I will concentrate on high resolution measurements where linewidths are in the kHz to GHz range.

Four topics will be treated. The first is the mechanisms responsible for inhomogeneous broadening of optical transitions. In addition to crystal strains and defects, we have recently shown that in very low strain crystals, inhomogeneous nuclear-spin fields can become the limiting mechanism and that optical inhomogeneous linewidths of only 10's of MHz can be achieved. This enables a direct measurement of isotope shifts of f-f transitions to be made. The source of these isotope shifts is the differential coupling to zero-point phonons. The second topic will be frequency domain spectral holeburning. Examples of the wide variety of mechanisms leading to holeburning will be drawn from fluoride and oxide crystals and glasses doped with praseodymium, europium, erbium, samarium and thulium ions. Holeburning can be of a transient or persistent nature depending on the mechanism. The third topic is the use of optical coherent transients such as the photon echo and optical free induction decay to study coherence phenomena in the time domain. The timescale for these measurements is generally shorter than that associated with holeburning and this provides a different time window on the dynamical processes, such as nuclear spin-flips, which limit optical coherence in solids at low temperature. Using photon echoes, measurements of homogeneous linewidths as narrow as 100Hz in ${}^{\text{f.Eu sup 3+}}$ colon YSO:ef. have been measured. The relationship between the frequency and time domain techniques will be explored using the concept of spectral diffusion. Finally the application of rare-earth spectroscopy to upconversion lasers which convert near IR pump light into green or blue laser emission will be briefly discussed.

Palestra Vespertina - D - 09/06/94

AFM - The Art of Touching Molecules

GAUB, H. E.

Physikdepartment der Technischen Universitaet Muenchen, 85748, Garching

During recent years the atomic force microscopy (AFM) has evolved into a versatile instrument for various experiments on the small length scale. Particularly the option of this novel technique to operate under aqueous conditions and in real time has initiated a broad spectrum of new investigations. As a result structural and micro mechanical properties of supramolecular arrangements like molecular films and macromolecular complexes were elucidated. As such the AFM has improved drastically the understanding of the molecular structure of Langmuir-Blodgett films. LB films have in turn evolved into standard objects for the improvement of the understanding of the fundamental imaging mechanisms. At low magnifications, the AFM allows the investigation of film roughness and micromechanical properties. At higher magnifications the molecular arrangement is determined. Such parameters are important for a basic understanding of the films as well as for their technological application e.g. as novel materials. Specific molecular interactions are a distinguishing aspect of life sciences. Attempts to investigate the forces that characterize these interactions were limited by the lack of suitable techniques to measure the forces between individual molecules. With the development of the AFM new instruments and techniques have become available with the precision and sensitivity to probe surfaces at forces down to the piconewton range. We used an AFM to measure the adhesion force between the tip of a cantilever, derivatized with avidin, and agarose beads with either biotin or desthiobiotin. Under conditions where only a limited number of molecular pairs were allowed to interact, we found the force required to separate tip and bead to be quantized in integer multiples of 160 piconewtons for biotin, 125 piconewtons for desthiobiotin and 85 piconewtons for iminobiotin. The measured force quanta are interpreted as the unbinding forces of individual molecular pairs. Experiments of this kind will not only allow a detailed investigation of molecular recognition events. They are also a pre-requisite for the use of the AFM for affinity microscopy

*Palestras Vespertinas - C - 09/06/94***Universality, Scaling, Correlations and Growth in a Two-Dimensional Cellular Structure**

DOMANY, E.

Department of Physics of Complex Systems, Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel

Cellular structures are observed in a wide variety of natural phenomena, that span a large number of scientific disciplines: biology, material science, physics and geology. Some of these systems evolve with time, in a manner governed by relatively simple dynamic laws. Evolving cellular structures are far from equilibrium, but nevertheless exhibit some intriguing properties, such as *universality and scaling*. Of particular interest are two-dimensional cellular structures, which are relatively simple to study experimentally, and whose dynamics are severely constrained by topological considerations.

My talk will review experimental and theoretical advances in our understanding of the temporal evolution of two-dimensional soap froth. The simple microscopic law (formulated by von Neumann) that governs the evolution of this system, gives rise to rather complex dynamics. The system evolves to a universal scaling state that is investigated on the basis of simple mean-field based dynamic equations and topological computer simulations. Since the dynamic equations have an entire family of scaling solutions, a *selection mechanism* must be invoked to explain universality. Other features of the system, such as dynamic correlations, survival statistics and growth of an evolving region from a single defect (embedded in an otherwise perfect hexagonal froth) will be briefly discussed.

This system constitutes an example where interplay between very simple table-top experiments and even simpler theory produces exciting results.

References

- [1] For reviews see: J. Stavans, Rep. Prog. Phys. **56** 733 (1993); J. A. Glazier and D. Weaire, J. Phys. Condens. Matter **4**, 1867 (1992); D. Weaire and N. Rivier, Contemp. Physics **25**, 59 (1984).
- [2] J. Stavans, E. Domany and D. Mukamel, Europhys. Lett. **15**, 479 (1991); D. Segel, D. Mukamel, O. Krichevsky and J. Stavans, Phys. Rev. E **47**, 812 (1993).
- [3] B. Levitan, E. Slepian, O. Krichevsky, J. Stavans and E. Domany, preprint (1994); B. Levitan, preprint (1994).

SHOULD ENTROPY BE ALWAYS EXTENSIVE?

TSALLIS, C.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

We review a variety of physical situations which strongly suggest that the entropy might be not always extensive (additive). We then propose, as a way out of these difficulties, a specific generalization of the standard entropy, hence of Statistical Mechanics and Thermodynamics. Finally, we review very recent works by several authors, where a set of remarkable mathematical properties as well as some physical applications are explored.

*Palestra Vespertina - A - 10/06/94***METALLIC CLUSTERS: FROM ELECTRONIC TO ATOMIC MAGIC NUMBERS**

FALICOV, L.

Department of Physics, University of California, Berkeley, CA 94720, USA

A pseudopotential calculation of the stability of Sodium small clusters will be presented. It is based on a local pseudo-potential scheme and local-density correlation and exchange. It is found that the most stable clusters are (1) those that correspond to closed electronic shells for clusters fewer than approximately 100 atoms, and (2) those that correspond to geometrical polyhedral clusters for numbers larger than that. A cross-over between electronic-level dominance and geometrical-structure stability is thus theoretically established. A temperature-size (T-N)

diagram is also derived for clusters up to ~ 1000 atoms. It contains three regions of stability: (1) a liquid phase, (2) a body-centered-cubic phase, and (3) a closed-packed phase. The melting line drops (because of the zero-point vibration energy) to $T = 0$ for clusters smaller than about 65 atoms.

Palestra Vespertina - B - 10/06/94

Growth of fluoride crystals for laser applications

CASSANHO, A.

Center for Materials Science and Engineering Massachusetts Institute of Technology

The choice of a laser host material is dependent on the mode of operation of the laser. Efficient absorption of the pump light is only one consideration when choosing a host material. Physical properties of the host and other spectroscopic properties of the combined host/active ion are also important. Fluoride crystals, for example, have many desirable properties for use as laser hosts. For laser diode pumping, Nd-doped fluoride hosts are at advantage compared to the oxides because of longer fluorescence lifetime of the upper laser level. Examples of such fluorides are the NaYF₄ and BaY₂F₈ systems doped with Nd. Flash lamp pumped fluoride lasers of interest are rare-earth-doped LiYF₄, Cr-doped LiMAIF₆ (M=Sr, Ca) and LiSrGaF₆. Other lasers of interest are upconversion fluoride lasers using crystal systems with combination of two or more of the RE ions such as Yb, Tm, Er and Ho. All the fluoride crystals mentioned above, with exception of the LiYF₄ system, still have problems related to crystal growth or material processing. The systems LiMAIF₆, for example, have been plagued by severe loss due to scattering in the grown crystals. BaY₂F₈ crystals are subject to cracking and diffuse scattering while NaYF₄ with ideal properties for diode pumped lasers has been, so far, only grown to a maximum size of 1cmx0.5cmx0.5cm. The loss for some fluoride crystals might originate from contaminants present in the starting materials. Also, the growth atmosphere might affect the lasing characteristics and contribute to loss for some fluoride crystals. Hydrocarbons present in the growth atmosphere, for example, may affect the valence state of dopant ions such as Cr, Yb and U in some fluoride systems. Oxygen contamination can appear as an oxyfluoride coating over YLF boules or as haze or milkiness in BaY₂F₈ and in crystals of the LICAF family. I will discuss our group's work on the material processing and crystal growth of some of the systems mentioned above and present our most recent data on the progress achieved with careful control of fluoride preparation, growth atmosphere and crystal growth parameters. Related spectroscopic and laser data will be presented.

Palestra Vespertina - C - 10/06/94

INVESTIGATION OF EPITAXIAL MAGNETIC FILMS AND MULTILAYERS OF TRANSITION METALS

PELZL, J.

Institut für Experimentalphysik III, Festkörperspektroskopie, Ruhr-Universität, D-44780 Bochum, FRG

In the last few years it has become possible to grow artificial layered structures composed of different types of metals using sophisticated evaporation techniques such as the molecular beam epitaxy (MBE). Among these novel materials epitaxial and multilayer films of transition metals have received great attention because of their particular magnetic properties as a function of chemical composition and compositional wave lengths. To investigate the magnetic properties most currently magnetic susceptibility measurements, ferromagnetic resonance and magneto-optic techniques are applied. Here we report on recent results obtained by conventional and photothermally modulated ferromagnetic resonance measurements on Fe and Co based epitaxial films and multilayers.

The ferromagnetic resonance (FMR) provides a sensitive tool to study the collective magnetic excitations across a multilayered film and to determine the anisotropy energies related to lattice misfits in the epitaxially grown layers. The photothermally modulated FMR, in addition, allows a lateral and depth resolved inspection. FMR measurements conducted on Fe-Ni-multilayers consisting of about 20 layers with a total thickness of 200 nm indicate the existence of two types of spin wave excitations. Stack modes extend through the whole multilayer averaging the magnetic properties. They exhibit well developed spin wave pattern, with the standing spin waves pinned at the top and bottom layer of the stack. Therefore these modes are sensitive to surface anisotropies of the exterior

boundaries of the film sample. Interface pinned modes exhibit a fine structure that is governed by the magnetic properties of the individual layer and by the interface. In the case of epitaxial Fe- and Co-layers it has been possible to identify and to quantify the different contributions to the anisotropy energy due to the surface and the structural misfit by angle, temperature and thickness dependent FMR studies.

This work is supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft, SFB 166.

Palestra Vespertina - D - 10/06/94

Liquid Crystal Phases of Self-Assembled Molecular Aggregates

HERZFELD, J.

Department of Chemistry, Brandeis University, Waltham, Massachusetts

Long-range order in solutions of reversibly self-assembling molecules results from interactions among the asymmetric aggregates. At high concentrations, repulsions between aggregates become significant, even for electrically neutral species. At the very least, the excluded volume of asymmetric aggregates creates formidable packing constraints which are relieved by orientational and positional alignment. Aggregate growth thus promotes long-range order, and long-range order facilitates growth. In these systems, nematic phases occur if aggregate growth is strong enough to induce orientational ordering at concentrations lower than those that induce positional ordering. In systems in which the strength of aggregation varies with temperature, theory and experiment show a triple point in the phase diagram at which isotropic, nematic and positionally ordered phases coexist. The symmetry of the positionally ordered phases reflects aggregate morphology: the polydispersity of aggregates that grow in one (two) dimension(s) to form rod-like (plate-like) particles suppresses the smectic (columnar) phase in favor of the columnar (smectic) phase. Thus theory and experiment show a region of columnar stability for polyaromatic dyes and drugs (chromonics) that stack to form rod-like aggregates and a region of smectic stability for rigid amphiphiles that form plate-like aggregates. Because plate-like aggregates pack more easily than rod-like aggregates, increasing concentration induces a rearrangement from rod-like to plate-like aggregates, and a transition from columnar to smectic ordering, in solutions of molecules, such as surfactants, capable of forming both types of aggregates. In mixtures of aggregating and non-aggregating species, the difficulty of packing the free spherically shaped particles among the elongated aggregates results in dramatic demixing such that a very concentrated solution of very large, highly aligned aggregates coexists with a relatively dilute solution depleted of the aggregating species. Such behavior has been observed in solutions of self-assembled protein filaments upon addition of globular proteins. In crowded solutions of sickle cell and normal hemoglobin, the normal hemoglobin inserts into the sickle cell hemoglobin aggregates rather than incur the free energy cost of phase separation. When two types of self-assembled filaments coexist, differences in flexibility will lead to separation into two nematic phases with greater orientational entropy in the phase with the more flexible filaments and more translational entropy in the phase with the more rigid filaments. This phenomenon may explain the "bundling" of protein filaments in the cytoskeletons of living cells.

Índice de Autores e Apresentações

M1	-	Primeiro Período da Manhã	-	Apresentações Orais
M2	-	Segundo Período da Manhã	-	Apresentações Orais
T1	-	Primeiro Período da Tarde	-	Posters
T2	-	Segundo Período da Tarde	-	Palestras Vespertinas

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
A. Junior, A.	10	T1	E10	134	Aksela, H.	9	T1	E08	21
Abal, G.	8	T1	E12	215	Aksela, S.	9	T1	E08	20
Abbade, M. L. F.	10	T1	E13	340	Aksela, S.	9	T1	E08	20
Abbate, M.	8	M2	06	365	Aksela, S.	9	M2	01	15
Abbate, M.	8	T1	E03	371	Aksela, S.	9	T1	E08	21
Abramof, E.	9	M2	08	69	Aladim, S. R.	9	T1	E11	119
Abras, A.	10	T1	E12	232	Albuquerque, A. R. P. L.	10	M1	05	162
Abrego-Castillo, I.	9	T1	E10	356	Albuquerque, D. F. de	8	T1	E10	104
Abritta, T.	9	T1	E08	22	Albuquerque, D. F. de	8	T1	E10	104
Abud, S. A. T.	9	M2	03	46	Albuquerque, E. L.	10	M1	13	332
Achete, C.	8	M1	06	363	Albuquerque, J. E. de	10	T1	E11	282
Achete, C. A.	10	M1	06	382	Alcantara Jr, P.	10	T1	E07	262
Acioli, L. H.	8	T1	E07	246	Alcantara, M. R.	10	T1	E03	173
Adabo, G. J.	10	M2	05	163	Alcantara, N. G. de	10	M2	07	197
Adabo, G. J.	10	M2	02	259	Alcaraz, F. C.	9	M1	12	113
Adams, J. A.	10	M2	13	334	Alcaraz, F. C.	9	T1	E11	120
Aegerter, A. M.	10	T1	E11	280	Alexandre, J. L.	8	T1	E03	367
Aegerter, M.	10	T1	E06	198	Alexandrowicz, Z.	10	M2	12	129
Aegerter, M.	8	T1	E03	369	Algatti, M. A.	8	M1	11	268
Aegerter, M. A.	9	T1	E10	355	Aliaga-Guerra, D.	9	T1	E09	221
Aegerter, M. A.	8	T1	E04	351	Aliaga-Guerra, D.	10	T1	E12	234
Aegerter, M. A.	8	T1	E07	246	Aliaga-Guerra, D.	8	T1	E12	216
Aegerter, M. A.	9	T1	E06	192	Allain, A. R.	8	T1	E05	150
Aegerter, M. A.	8	T1	E04	352	Allenspach, P.	8	M1	09	206
Aegerter, M. A.	9	T1	E03	381	Almeida, D. de P.	10	T1	E08	32
Aegerter, M. A.	8	T1	E13	316	Almeida, D. P.	10	T1	E08	32
Aegerter, M. A.	10	M2	02	259	Almeida, J. R. L. de	10	T1	E09	144
Aegerter, M. A.	9	T1	E02	275	Almeida, J. R. L. de	8	M2	12	100
Agostinho Neto, A.	10	T1	E02	57	Almeida, L. A. C. de	10	T1	E03	172
Agrawal, G.	10	M1	02	258	Almeida, L. A. C. de	10	T1	E03	172
Agren, H.	9	M2	01	15	Almeida, L. A. C. de	10	T1	E03	175
Aguiar, F. M. de	10	M1	09	228	Almeida, L. A. C. de	10	T1	E03	176
Aguiar, F. M. de	10	M2	09	229	Almeida, M. P. de	8	T1	E12	213
Aguiar, F. M. de	10	M1	09	228	Almeida, N. S. de	8	T1	E12	213
Aguiar, J. A.	8	T1	E13	314	Almeida, N. S. de	9	T1	E13	325
Aguiar, J. A.	9	T1	E03	380	Almeida, W. M. M.	9	T1	E07	287
Aguiar, J. A.	8	T1	E04	352	Altamirano, M.	10	M1	03	49
Aguiar, J. A.	8	M1	04	348	Altoe, M. V. P.	9	T1	E09	223
Aguiar, J. A.	8	T1	E04	353	Altoe, M. V. P.	9	T1	E09	225
Aguiar, J. A.	10	T1	E11	282	Altshuler, B. L.	9	M1	02	318
Aguiar, J. A.	8	T1	E04	353	Alvarenga, A. D.	9	T1	E06	193
Akcelrud, L.	9	T1	E02	275	Alvarez, F.	10	T1	E03	80
Aksela, H.	9	T1	E08	20	Alvarez, F.	10	T1	E13	339
Aksela, H.	9	M2	01	15	Alves Jr, C.	9	T1	E06	193

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Alves Junior, N.	9	T1	E12	126	Anda, E. V.	8	M2	13	302
Alves, A. R.	8	T1	E13	305	Anda, E. V.	8	M2	04	349
Alves, C. A. P.	9	T1	E12	126	Anda, E. V.	8	T1	E13	314
Alves, E. S.	8	T1	E13	309	Anda, E. V.	9	M1	09	218
Alves, E. S.	8	T1	E13	312	Anda, E. V.	8	M1	13	300
Alves, E. S.	8	T1	E13	313	Andrade Jr, R. de	10	M2	04	362
Alves, E. S.	8	M1	13	300	Andrade Junior, J. S.	8	M2	07	180
Alves, G. P.	10	T1	E03	175	Andrade Junior, R. de	10	M2	04	361
Alves, G. P.	10	T1	E03	172	Andrade Neto, A. V. de	8	T1	E03	370
Alves, H. W. L.	9	T1	E13	329	Andrade Neto, M. A.	9	T1	E13	323
Alves, J. L. A.	9	M1	02	317	Andrade, L. A.	9	T1	E02	275
Alves, K. M. B.	10	T1	E12	235	Andreata, M. W.	8	M2	01	6
Alves, K. M. B.	9	T1	E09	225	Andreeta, J. P.	9	T1	E01	72
Alves, M. do C. M.	9	M1	07	186	Andreeta, J. P.	9	T1	E01	74
Alves, M. do C. M.	8	M1	10	87	Andreeta, J. P.	9	M2	08	70
Alves, M. E. M. da V.	10	T1	E05	93	Andreeta, J. P.	9	T1	E01	74
Alves, N.	9	M1	11	271	Andreeta, M. R. B.	9	M2	04	285
Alves, O. C.	8	T1	E02	41	Andreeta, M. R. B.	9	T1	E01	74
Alves, O. L.	8	M1	02	240	Anoardo, E.	10	T1	E03	171
Alves, O. L.	10	T1	E03	81	Anteneodo, C.	10	T1	E02	55
Alves, O. L.	10	M1	08	77	Anteneodo, C.	8	M2	03	37
Alves, O. L.	10	M1	08	77	Antonelli, A.	10	M1	13	331
Alves, O. L.	8	T1	E01	64	Antunes, A. B.	9	T1	E09	224
Alves, O. L.	8	M1	09	205	Antunes, L. M. D.	9	T1	E08	16
Alves, O. L.	8	M1	08	60	Aragao, P. H. A.	10	T1	E02	54
Alves, O. L.	8	T1	E07	248	Arakaki, H.	8	T1	E05	151
Alves, R. M. P.	9	T1	E07	287	Aranha, N.	10	T1	E03	81
Alves, V. A.	9	T1	E03	381	Aranha, N.	10	M1	08	77
Alves, V. M.	10	T1	E03	173	Aranha, N.	10	M1	08	77
Alves, V. M.	9	M1	10	167	Aranha, N.	8	T1	E01	64
Amaral, A. C. C. do	10	T1	E03	172	Aranha, N.	8	M1	08	60
Amaral, L.	10	M1	09	228	Araujo Filho, P. F. de	8	T1	E10	103
Amaral, L.	9	M2	06	373	Araujo, C. B. de	10	T1	E07	262
Amaral, L.	8	T1	E03	371	Araujo, C. B. de	10	M2	02	258
Amaral, L.	10	M1	06	383	Araujo, C. B. de	8	T1	E07	246
Amaral, L.	8	M2	07	179	Araujo, C. B. de	10	M2	02	259
Amaral, L.	8	M2	07	180	Araujo, C. B. de	8	T1	E07	249
Amaral, L.	10	M1	06	382	Araujo, C. B. de	9	M1	13	249
Amaral, L.	9	M2	06	374	Araujo, C. J. de	9	M2	07	188
Amaral, L. Q.	9	T1	E02	275	Araujo, D. B. de	9	T1	E06	193
Amaral, L. Q.	8	T1	E07	247	Araujo, E. B. de	10	M2	08	80
Amaral, L. Q.	8	M1	01	166	Araujo, H. S. S. de	10	T1	E04	97
Amaral, L. Q. do	10	T1	E03	170	Araujo, J. F. de	8	M2	08	62
Amaral, L. Q. do	9	M2	10	169	Araujo, J. H. de	9	T1	E09	224
Amato, M. A.	10	T1	E13	343	Araujo, J. H. de	9	T1	E09	220
Amato, M. A.	10	T1	E03	176	Araujo, J. M. de	9	T1	E12	126
Amorim, C. F.	9	T1	E05	159	Araujo, J. P. de	10	T1	E02	53
Anazawa, R. M.	10	T1	E07	260	Araujo, L. E. E. de	10	T1	E07	262
Anazawa, R. M.	10	T1	E07	261	Araujo, L. E. E. de	10	M2	02	259
An, C. Y.	9	T1	E01	73	Araujo, M. A. B. de	10	M2	08	80
An, C. Y.	9	T1	E01	73	Araujo, M. A. de	10	T1	E11	279
An, C. Y.	8	T1	E06	182	Araujo, M. T. de	9	M2	01	14
Anda, E.	8	T1	E13	309	Araujo, M. T. de	9	T1	E08	18
Anda, E. V.	8	T1	E13	306	Araujo, M. T. de	9	T1	E08	19
Anda, E. V.	10	T1	E13	337	Araujo, R. C. de	9	T1	E09	220
Anda, E. V.	8	T1	E13	311	Araujo, R. C. de	9	T1	E09	220

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Araujo, R. C. de	9	T1	E09	224	Bagnato, V.	9	M1	01	12
Araujo, S. M. V.	10	T1	E06	198	Bagnato, V. S.	10	T1	E13	335
Ardisson, J. D.	9	T1	E09	222	Bagnato, V. S.	9	T1	E03	375
Arenas, J. S. A.	10	T1	E06	201	Bagnato, V. S.	9	T1	E03	375
Arenzon, J. J.	8	T1	E09	106	Bagnato, V. S.	9	M1	01	13
Arenzon, J. J.	8	T1	E09	107	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	17
Arenzon, J. J.	8	T1	E09	107	Bagnato, V. S.	10	T1	E07	261
Argenter, M. A.	9	M1	08	69	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	17
Argo Jr, S. C.	10	M1	06	382	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	17
Arimondo, E.	10	T1	E07	262	Bagnato, V. S.	8	T1	E07	245
Arnault, H. H.	9	T1	E10	359	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	17
Arruda, A. S. de	9	T1	E12	124	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	18
Arruda, A. S. de	9	T1	E12	124	Bagnato, V. S.	9	M2	01	14
Arruda, A. S. de	10	T1	E09	142	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	18
Arruda, A. S. de	10	T1	E09	142	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	18
Auffret, S.	10	M1	09	227	Bagnato, V. S.	8	T1	E07	246
Auler, L. T. S.	10	M2	11	299	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	19
Aulet, A.	10	T1	E06	200	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	19
Auric, P.	10	M1	09	227	Bagnato, V. S.	9	M1	01	13
Ausmees, A.	9	T1	E08	20	Bagnato, V. S.	9	M1	12	112
Ausmees, A.	9	M2	01	15	Bagnato, V. S.	9	T1	E08	19
Ausmees, A.	9	T1	E08	21	Bagnato, V. S.	9	T1	E04	255
Austin, R. F.	10	T1	E13	338	Bagnato, V. S.	9	M1	01	13
Auto, M. M.	8	M2	13	302	Bagnato, V. S.	10	T1	E13	345
Avanci, L. H.	9	T1	E01	73	Bagnato, V. S.	9	M2	02	252
Avanci, L. H.	9	M2	08	70	Bagnato, V. S.	9	M2	02	251
Avignon, M.	9	M2	09	219	Bahiana, M.	10	T1	E09	138
Avila, M. de A.	8	T1	E04	351	Baia Neto, A. L.	10	M1	06	382
Avillez, R. R. de	9	T1	E06	190	Baibich, M. N.	9	T1	E09	224
Ayta, W. E. F.	8	T1	E01	65	Baibich, M. N.	9	T1	E09	224
Azechi, L. S.	8	T1	E05	149	Baibich, M. N.	8	T1	E03	371
Azevedo, A.	10	T1	E12	236	Bajaj, K. K.	10	M1	13	331
Azevedo, A.	10	M2	09	229	Balancin, O.	8	T1	E06	183
Azevedo, A.	10	M2	09	229	Baldan, C. A.	9	T1	E07	293
Azevedo, G. de M.	10	T1	E08	26	Baldochi, S. L.	8	T1	E01	65
Azevedo, I.	8	T1	E04	351	Baldochi, S. L.	9	T1	E01	74
Azevedo, I.	9	T1	E09	222	Baldochi, S. L.	9	T1	E01	75
Azevedo, S. A. F. de	9	T1	E02	277	Baldochi, S. L.	8	T1	E01	65
Azevedo, W. F.	10	T1	E04	97	Baldochi, S. L.	10	M1	08	77
Azevedo, W. M. de	10	T1	E11	282	Baldochi, S. L.	8	M1	08	59
B. Filho, N. C.	10	T1	E06	203	Balogh, D. T.	8	M1	11	267
Baesso, M. L.	10	M1	07	196	Baltazar-Rodrigues, J.	8	M2	08	62
Baffa, O.	9	T1	E05	157	Baltensperger, W.	8	T1	E12	209
Baffa, O.	10	M1	05	161	Balzuweit, K.	10	T1	E05	92
Baffa, O.	9	M2	03	46	Bandeira, I. N.	9	T1	E01	73
Baggio-Saitivitch, E.	8	T1	E12	214	Baptista, G. B.	8	T1	E03	368
Baggio-Saitivitch, E.	9	T1	E09	223	Baptista, G. B.	10	T1	E08	31
Baggio-Saitovich, E.	8	M1	04	347	Baptista, G. B.	8	T1	E03	371
Baggio-Saitovitch, E.	8	T1	E04	351	Baptista, G. B.	10	M2	06	384
Baggio-Saitovitch, E.	9	T1	E03	379	Baptista, G. B.	8	M2	03	38
Baggio-Saitovitch, E.	9	T1	E03	380	Baptista, M. da S.	10	T1	E10	137
Baggio-Saitovitch, E.	8	T1	E04	352	Baranauskas, V.	10	M1	06	382
Baggio-Saitovitch, E.	9	T1	E10	355	Baran, Z.	8	M2	10	87
Baggio-Saitovitch, E.	9	T1	E09	225	Barberis, G. E.	8	M2	03	38
Baggio, R.	10	T1	E04	94	Barberis, G. E.	9	T1	E13	320
Bagnato, O. R.	8	T1	E05	148	Barberis, G. E.	9	M2	04	285

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Barberis, G. E.	9	T1	E10	359	Basmaji, P.	9	T1	E13	322
Barbero, G.	9	M1	10	167	Basmaji, P.	8	T1	E07	246
Barbero, G.	9	M2	10	169	Basmaji, P.	8	T1	E13	309
Barbeta, V.	9	M1	12	113	Basmaji, P.	10	T1	E13	341
Barbeta, V. B.	8	M1	09	206	Basmaji, P.	8	T1	E13	313
Barbeta, V. B.	8	M1	04	347	Basmaji, P.	10	T1	E13	345
Barbieri, R. S.	8	T1	E05	147	Basmaji, P.	8	T1	E13	316
Barbieri, R. S.	10	T1	E08	26	Bassi, D.	9	T1	E08	16
Barbosa Filho, F. F.	9	T1	E12	122	Bass, M.	8	M2	02	243
Barbosa, A. A.	10	T1	E03	171	Basso, H. C.	10	T1	E06	197
Barbosa, A. A.	10	T1	E03	171	Basso, H. C.	10	T1	E06	198
Barbosa, A. A.	10	T1	E03	171	Basso, H. C.	9	M2	04	285
Barbosa, A. A.	10	T1	E03	176	Bassora, L. A.	10	T1	E06	200
Barbosa, A. C. de C.	10	T1	E12	234	Bassora, L. A.	10	T1	E03	82
Barbosa, A. F.	10	M1	05	161	Bastos, P. L.	10	T1	E13	342
Barbosa, A. F.	9	M2	07	189	Bastos, P. L.	10	T1	E13	342
Barbosa, G. A.	9	T1	E04	254	Bastos, P. L.	8	T1	E13	312
Barbosa, G. A.	9	T1	E04	254	Bastos, T. C.	10	T1	E11	281
Barbosa, G. A.	10	M1	02	257	Batelaan, H.	9	M2	01	14
Barbosa, G. A.	9	T1	E04	254	Batelaan, H.	9	T1	E08	21
Barbosa, G. A.	10	M1	02	257	Batista, A. de A.	9	T1	E10	358
Barbosa, L. C.	10	M2	13	333	Batista, D. V. S.	10	T1	E13	339
Barbosa, L. C.	8	M1	02	240	Batista, F. A.	9	T1	E09	222
Barbosa, L. C.	10	T1	E03	81	Batista, W. O. G.	8	M2	10	87
Barbosa, L. C.	10	M1	08	77	Baughman, R. H.	9	M1	11	270
Barbosa, L. C.	10	M1	08	77	Baumvol, I.	8	T1	E03	367
Barbosa, L. C.	8	T1	E01	64	Baziruwaha, J.	8	T1	E03	366
Barbosa, L. C.	8	M1	08	60	Bean, J. C.	9	T1	E13	324
Barbosa, L. C.	8	T1	E13	315	Beatrice, C. R. S.	8	T1	E06	180
Barbosa, L. C.	8	T1	E07	248	Beatrici, A.	8	T1	E12	210
Barbosa, M. C.	9	T1	E12	121	Becerra, C. C.	9	M1	12	113
Barbosa, M. C.	10	M1	12	128	Beerens, J.	10	M2	13	334
Barbosa, M. C.	9	T1	E12	121	Beer, R.	9	M2	12	115
Barbosa, M. V.	8	T1	E04	352	Begazo, P. C.	8	T1	E01	65
Barbosa, M. V.	8	M1	04	348	Behar, M.	10	T1	E08	27
Barbosa, M. V.	8	T1	E04	353	Behar, M.	10	T1	E08	32
Barci, D. G.	8	T1	E13	307	Behar, M.	8	M2	07	179
Bargo, P. R.	9	M2	05	154	Behar, M.	8	M2	07	180
Barja, P. R.	8	T1	E02	41	Behar, M.	10	T1	E11	281
Barranco, A. V.	9	T1	E04	255	Bejarano, J. M. Z.	8	M1	07	177
Barranco, A. V.	10	M1	02	258	Beliaev, D.	9	T1	E13	325
Barreto, A. M. F.	10	T1	E06	201	Beliaev, D.	9	T1	E13	327
Barreto, F. C. de S.	10	M1	12	128	Bellini, J. V.	10	T1	E13	345
Barros, H. G. P. L. de	10	M2	03	51	Belo, L. C. M.	9	T1	E05	157
Barsella, A.	10	T1	E07	262	Bemelmans, D.	10	T1	E03	83
Barthem, R. B.	10	T1	E07	262	Bemski, G.	8	T1	E02	40
Barthem, V. M. T. S.	8	M2	09	208	Ben-Dor, L.	8	M1	04	347
Baseia, B.	9	T1	E04	253	Ben-Dor, L.	8	T1	E04	353
Baseia, B.	9	T1	E04	255	Benatti, C. R.	10	T1	E02	57
Basmaji, P.	8	M2	13	301	Bento, C. A.	10	T1	E06	203
Basmaji, P.	8	T1	E13	303	Benussi, A. A.	10	T1	E13	340
Basmaji, P.	8	T1	E13	303	Berezin, A. A.	10	T1	E09	141
Basmaji, P.	8	T1	E13	304	Bernardes, A. T.	10	M1	12	129
Basmaji, P.	8	T1	E13	304	Bernardes, A. T.	10	T1	E09	143
Basmaji, P.	10	T1	E13	336	Bernardes, A. T.	10	T1	E02	55
Basmaji, P.	10	T1	E13	337	Bernardes, A. T.	10	T1	E02	56

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Bernardes, L. A.	10	T1	E04	96	Borges Jr, I.	10	M2	01	25
Bernardino, L.	8	M1	06	363	Borges, A. N.	8	T1	E13	308
Bernussi, A. A.	10	M1	13	331	Borges, C. P. F.	8	T1	E02	39
Bernussi, A. A.	10	T1	E07	262	Borges, H.	8	M1	09	206
Berreta, J. R.	9	T1	E05	158	Borges, H. A.	9	T1	E10	356
Berthier, C.	10	M2	11	299	Borges, J. F. M.	10	T1	E12	230
Berthier, Y.	10	M2	11	299	Borges, N. M.	8	T1	E07	245
Bertolino, L. C.	9	T1	E07	290	Borges, N. M.	8	T1	E07	247
Bertucci Neto, V.	8	T1	E05	152	Borghs, G.	10	T1	E13	340
Bettega, M. H. F.	10	M2	01	24	Boschetti, S. R.	10	T1	E02	52
Bettega, M. H. F.	8	T1	E08	7	Bosquetti, D.	9	T1	E13	327
Beverini, N.	10	T1	E07	260	Botta Filho, W. J.	9	M2	07	189
Bezerra Jr, A. G.	10	T1	E09	141	Botta Filho, W. J.	8	M1	07	178
Bezerra, C. G.	9	T1	E12	126	Botta Filho, W. J.	8	T1	E06	181
Bhalla, A.	8	M2	08	61	Botta Filho, W. J.	9	M1	07	186
Biaggi, M. H.	8	T1	E02	42	Bouabci, M. B.	10	M1	12	127
Bianchi, I.	9	T1	E07	293	Bouabci, M. B.	9	T1	E12	124
Bian, S.	8	M2	05	241	Boudinov, H.	10	T1	E08	27
Bian, S.	9	T1	E04	255	Bourson, P.	10	T1	E03	80
Biasi, R. S. de	10	T1	E06	198	Bourson, P.	10	M2	08	79
Bibiano, M. F. de A.	10	T1	E10	136	Boyansovsky, D.	9	T1	E02	276
Bielschowsky, C.	8	M2	01	5	Bozano, D. de F.	8	T1	E03	369
Bienenstock, A.	8	M1	10	85	Bradley, J. A.	10	M1	13	331
Bigelow, N.	9	T1	E08	17	Branco, N. da S.	9	T1	E12	123
Bill, E.	10	T1	E12	233	Brasil, M. J. S. P.	10	M1	13	331
Bill, E.	8	T1	E02	40	Brasil, M. J. S. P.	10	T1	E13	339
Bindilatti, V.	8	T1	E13	314	Brasil, M. J. S. P.	10	T1	E13	340
Bisch, P. M.	10	T1	E02	53	Brasil, V. de B.	10	T1	E06	198
Bisch, P. M.	10	M2	03	51	Braun, T.	10	T1	E10	134
Bisch, P. M.	10	T1	E02	54	Bray, G.	9	M2	01	15
Bittencourt, C.	10	T1	E03	80	Bray, G.	9	T1	E08	21
Bittencourt, C.	10	T1	E13	339	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	28
Blak, A. R.	8	T1	E01	65	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	29
Blak, A. R.	9	T1	E02	274	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	29
Blak, A. R.	10	T1	E03	83	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	29
Blanco, E.	9	M1	07	187	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	30
Boechat-Roberty, H. M.	10	T1	E08	34	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	30
Boechat, B.	8	T1	E10	103	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	31
Boechat, B.	9	T1	E11	118	Brescansin, L. M.	10	T1	E08	33
Bolfarini, C.	10	M2	07	197	Briozzo, C. B.	10	T1	E10	131
Bolina, O.	9	T1	E11	116	Brito, A. L. de	9	T1	E04	253
Bolina, O.	9	T1	E11	116	Brito, A. N. de	8	T1	E08	9
Bonagamba, T.	10	M2	11	297	Brito, A. N. de	9	T1	E02	277
Bonagamba, T. J.	10	M1	11	296	Brito, A. N. de	9	T1	E08	20
Bonagamba, T. J.	10	M1	11	295	Brito, A. N. de	9	T1	E08	20
Bonagamba, T. J.	10	M1	11	295	Brito, A. N. de	9	M2	01	15
Bonagamba, T. J.	10	M1	11	294	Brito, A. N. de	9	T1	E08	21
Bonagamba, T. J.	9	T1	E07	289	Brito, A. N. de	9	T1	E08	21
Bonagamba, T. J.	10	M1	11	295	Brito, J. J. da S.	8	T1	E12	215
Bonagamba, T. J.	9	T1	E07	289	Brito, P. E. de	8	T1	E12	215
Bonagamba, T. J.	8	M2	11	269	Brito, V. P.	9	M2	12	115
Bonardi, C.	10	T1	E11	278	Bruckmann, M. E.	10	T1	E12	231
Bonventi Jr, W.	10	M1	05	162	Brum, J. A.	10	M2	13	333
Boone, P. M.	8	M2	05	243	Brum, J. A.	10	M1	13	331
Borba, E. C.	9	M2	07	189	Brum, J. A.	10	T1	E13	340
Borelli, M. E. S.	8	T1	E10	103	Brum, J. A.	10	M1	13	331
					Brum, J. A.	10	T1	E13	340

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Brum, J. A.	9	T1	E13	325	Campos, M. F. de	8	M2	09	207
Brunnet, L. G.	9	M2	12	114	Campos, M. S. de	9	T1	E02	273
Brunnet, L. G.	10	T1	E10	137	Campos, V. B.	8	T1	E13	307
Bruno, J. C.	8	T1	E06	184	Campos, V. B.	8	T1	E13	315
Brusa, R. S.	10	M1	06	382	Candela, D. S.	8	T1	E04	352
Bud'ko, S. L.	9	T1	E10	355	Candela, D. S.	9	T1	E10	355
Bud'ko, S. L.	8	T1	E04	352	Canha, M. A.	10	T1	E03	172
Bud'ko, S. L.	9	T1	E10	356	Cantao, M. P.	9	M2	08	71
Bud'ko, S. L.	10	T1	E12	237	Canuto, S.	9	M1	02	318
Bud'ko, S. L.	8	T1	E12	217	Canuto, S.	10	T1	E13	336
Bulhoes, L. O. S.	9	M2	04	285	Canuto, S.	8	T1	E08	7
Bulhoes, L. O. S.	9	T1	E02	275	Canuto, S.	8	M2	04	350
Buntar, V.	9	T1	E10	354	Caparica, A. A.	10	T1	E10	133
Buntar, V.	10	T1	E09	138	Capaz, R.	9	M1	02	318
Burylov, S.	9	M1	10	166	Capaz, R.	9	T1	E13	321
Bussandri, A. P.	9	T1	E07	292	Capaz, R. B.	9	M1	02	318
Bustamante, A. N. P.	9	T1	E01	74	Capaz, R. B.	9	T1	E13	329
Buttiker, M.	8	T2	12	386	Carara, M.	8	T1	E05	149
Buzano, C.	9	T1	E12	125	Carara, M. A.	8	T1	E03	370
Cabeza, C.	10	T1	E07	263	Cardona, M.	10	M1	13	332
Cabral, F. A. O.	9	T1	E09	220	Cardoso, A. J. C.	10	T1	E13	335
Cabral, F. A. O.	9	T1	E09	220	Cardoso, D.	10	M1	11	296
Cabral, F. de A. O.	9	T1	E09	224	Cardoso, D.	10	M1	11	295
Cabrera, G.	10	T1	E10	136	Cardoso, D.	9	T1	E06	192
Cabrera, G. G.	8	M2	09	208	Cardoso, L. P.	9	T1	E01	72
Caceres, M. O.	10	T1	E10	131	Cardoso, L. P.	9	T1	E01	73
Cadilhe, M. W.	10	T1	E08	31	Cardoso, L. P.	9	T1	E03	378
Cai, W. Q.	10	T1	E07	260	Cardoso, L. P.	9	M2	08	70
Cajaty, G. B.	10	T1	E06	201	Cardoso, L. P.	8	M1	09	206
Calcagno, M.	10	M1	03	49	Carles, R.	9	T1	E13	322
Caldas, I. L.	10	T1	E10	137	Carmo, L. C. S. do	8	T1	E01	63
Caldas, M. J.	9	T1	E02	276	Carmo, L. C. S. do	10	M1	08	78
Caldas, M. J.	10	T1	E11	281	Carneiro, C. E. I.	10	M1	12	127
Caldas, M. J.	9	T1	E13	326	Carneiro, C. E. I.	9	T1	E12	124
Caldas, M. J.	9	T1	E02	277	Carneiro, C. E. I.	8	T1	E10	103
Calvo, Rafael	8	M2	03	38	Carneiro, C. E. I.	9	T1	E11	117
Camargo, F.	9	T1	E11	117	Carneiro, G. N.	9	T1	E13	323
Camargo, M. B. de	10	T1	E03	83	Carrico, A. S.	10	T1	E12	232
Camargo, P. C. de	10	T1	E12	231	Carrico, A. S.	10	M2	06	385
Camargo, P. C. de	8	T1	E12	212	Cartaxo, S. J. M.	8	T1	E13	310
Camargo, P. C. de	8	T1	E06	182	Carvalho F., C. A. A. de	9	T1	E02	276
Cambronero, L. E. G.	8	T1	E06	185	Carvalho F., C. A. A. de	10	T1	E10	138
Camelo Neto, G.	8	T1	E09	109	Carvalho Jr, J. S. de	8	T1	E04	350
Camilo Junior, A.	10	M2	03	50	Carvalho Jr, J. S. de	9	T1	E10	354
Camilo Junior, A.	9	T1	E02	276	Carvalho Jr, W. de	10	T1	E13	342
Campana Filho, P. S.	9	T1	E02	274	Carvalho Jr, W. de	9	T1	E01	74
Campbell, C.	8	M2	06	365	Carvalho Jr, W. de	9	T1	E01	76
Campomanes, R. R.	9	T1	E01	73	Carvalho, A. C. C. de	8	M1	03	35
Campos, A. A. G.	10	T1	E12	232	Carvalho, A. M. de A.	8	T1	E09	110
Campos, A. A. G.	9	T1	E09	222	Carvalho, A. R. R. de	8	T1	E13	311
Campos, F. A.	10	T1	E06	201	Carvalho, A. T. G. de	10	T1	E13	341
Campos, H. S.	9	T1	E13	328	Carvalho, A. V. de	8	T1	E03	372
Campos, J. B. de	10	T1	E13	342	Carvalho, B. C. de	10	M1	05	160
Campos, J. B. de	10	T1	E13	342	Carvalho, C. A. de	8	T1	E13	307
Campos, J. B. de	8	T1	E13	312	Carvalho, C. A. M.	10	T1	E05	91
Campos, J. L.	8	M1	05	146	Carvalho, C. A. M.	10	T1	E04	97

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Carvalho, C. L.	9	T1	E10	355	Cecchini, S. C. M.	9	M2	03	47
Carvalho, C. L.	8	T1	E04	351	Ceia, M. A. R. de	10	T1	E08	32
Carvalho, C. L.	8	T1	E04	352	Celaschi, S.	10	M2	05	163
Carvalho, E. G. de	10	T1	E12	233	Celaschi, S.	10	M2	02	259
Carvalho, I. C. S.	8	T1	E07	245	Cella, N.	8	T1	E02	41
Carvalho, I. C. S.	8	T1	E07	248	Cerdeira, F.	10	T1	E05	91
Carvalho, J. F.	9	T1	E01	72	Cerdeira, F.	10	T1	E13	338
Carvalho, M. A.	10	T1	E09	140	Cerdeira, F.	9	T1	E13	324
Carvalho, M. de C.	9	T1	E04	256	Cesar, C. L.	10	M2	13	333
Carvalho, M. de C.	10	T1	E07	265	Cesar, C. L.	10	T1	E13	338
Carvalho, M. M. G. de	10	T1	E13	342	Cesar, C. L.	8	M1	02	240
Carvalho, M. M. G. de	9	T1	E01	76	Cesar, C. L.	10	T1	E07	261
Carvalho, M. W. N. C.	10	M1	11	295	Cesar, C. L.	9	M2	05	154
Carvalho, R. A.	9	M2	04	285	Cesar, C. L.	10	T1	E03	81
Carvalho, R. P. de	9	M2	03	48	Cesar, C. L.	8	M1	08	60
Carvalho, R. R. L. de	8	M2	13	302	Cesar, C. L.	8	T1	E13	315
Carvalho, V. E. de	8	M2	06	366	Cesar, C. L.	8	T1	E07	248
Casagrande, D.	9	T1	E13	320	Cesaro, A.	10	T1	E02	56
Casas, J. S.	10	T1	E04	95	Cesar, S. L.	10	M2	06	384
Cassanho, A.	10	T2	09	390	Cescato, L.	10	M1	06	383
Cassaró, F. A. M.	9	T1	E05	159	Cescato, L.	8	M2	05	241
Cassiano, M. M.	10	T1	E02	53	Ceschin, A. M.	10	T1	E13	344
Castellano, E. E.	10	T1	E04	95	Ceschin, A. M.	9	M2	08	70
Castellano, E. E.	10	T1	E04	95	Ceschin, A. M.	9	T1	E01	75
Castelletto, V.	10	T1	E03	170	Chacham, H.	8	T1	E08	7
Castilho, C. M. C. de	8	M2	06	366	Chacham, H.	9	T1	E13	320
Castilho, C. M. C. de	10	M2	06	385	Chacham, H.	8	T1	E08	7
Castilho, C. M. C. de	8	T1	E03	370	Chacham, H.	10	T1	E13	341
Castner, D.	8	M2	06	365	Chacham, H.	8	T1	E08	11
Castro-Faria, N. V. de	10	M2	01	25	Chacham, H.	9	M1	02	318
Castro-Faria, N. V. de	10	T1	E08	26	Chagas, J. R.	8	T1	E02	39
Castro, A. R. B. de	8	T1	E05	148	Chahine, J.	10	T1	E02	56
Castro, A. R. B. de	8	T1	E05	148	Chamberod, A.	10	M1	09	227
Castro, A. R. B. de	9	M2	05	154	Chambouleyron, I.	9	M2	08	70
Castro, A. R. B. de	10	M1	05	160	Chambouleyron, I.	9	T1	E01	73
Castro, A. R. B. de	8	T1	E05	148	Chambouleyron, I.	10	T1	E13	341
Castro, A. R. B. de	10	T1	E04	96	Chambouleyron, I.	8	T1	E03	372
Castro, C. S. C. de	8	M2	03	38	Chambouleyron, I. E.	9	T1	E01	71
Castro, J. C. de	9	T1	E05	156	Chame, A. M. N.	9	T1	E12	122
Castro, J. C. de	9	M2	05	153	Chame, A. M. N.	9	T1	E12	123
Castro, J. D. e	10	T1	E12	234	Chao, N. C.	10	M1	12	127
Castro, J. D. e	9	T1	E13	326	Charbonneau, S.	10	M2	13	334
Caticha, N.	8	T1	E09	108	Chate, H.	9	M2	12	114
Caticha, N.	8	T1	E09	108	Chattah, A. K.	10	T1	E10	131
Caticha, N.	8	M2	12	101	Chavantes, C.	9	M1	05	152
Caticha, N.	8	T1	E09	111	Chaves, A. S.	8	T1	E13	305
Cattani, M. M.	8	T1	E02	42	Chaves, A. S.	9	T1	E13	320
Catunda, T.	10	M2	02	258	Chaves, A. S.	9	M1	02	318
Catunda, T.	10	M2	02	259	Chaves, C. M.	9	M1	12	114
Catunda, T.	8	T1	E07	246	Chavira, A.	8	M1	04	348
Catunda, T.	10	T1	E07	264	Cheng, B. K.	8	T1	E08	8
Cavalcante, E. M.	9	T1	E02	273	Cheng, B. K.	8	T1	E08	8
Cavalcante, I. P.	10	M1	05	160	Cheng, B. K.	8	T1	E08	11
Cavalcanti, L. P.	8	M2	10	87	Cheng, B. K.	8	T1	E08	12
Cavalcanti, R. M.	10	T1	E10	138	Chen, S.	8	M2	10	88
Cavalcanti, S. B.	10	M1	02	258	Chesman, C.	9	M2	02	251

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Chesman, C.	9	M2	02	251	Costa Jr, M. I. da	10	T1	E12	231
Chesman, C.	10	T1	E07	265	Costa Jr, M. I. da	9	T1	E09	224
Chevrollier, M.	9	M2	02	251	Costa Jr, M. I. da	9	T1	E09	226
Chiaradia, C.	9	T1	E05	156	Costa, A. R. da	8	T1	E06	185
Chiaradia, C.	9	M2	05	153	Costa, A. R. H.	9	T1	E07	293
Chierice, G. O.	9	T1	E02	274	Costa, B. da	9	T1	E03	380
Chinaglia, D. L.	9	T1	E02	272	Costa, E. J. X.	8	T1	E02	44
Chinaglia, E. de F.	8	T1	E01	63	Costa, F. A. da	10	T1	E10	134
Chiquito, A. J.	8	T1	E13	308	Costa, F. A. da	8	T1	E09	107
Chitta, V. A.	10	T1	E13	336	Costa, F. A. da	8	T1	E09	108
Chitta, V. A.	10	T1	E13	345	Costa, F. A. da	9	T1	E12	126
Cho, K.	9	T1	E13	321	Costa, F. E. da	10	T1	E07	264
Christ, B.	8	T1	E05	147	Costa, F. E. da	9	T1	E05	158
Christides, C.	10	T1	E12	230	Costa, I. F.	10	T1	E13	340
Chubaci, J. F. D.	8	T1	E03	370	Costa, J. A. P. da	9	T1	E13	326
Chu, S. N. G.	10	M1	13	331	Costa, J. A. T. B. da	8	T1	E06	183
Cilense, M.	8	T1	E06	180	Costa, J. A. T. B. da	8	T1	E03	371
Cinbis, C.	10	T1	E12	236	Costa, M. A.	8	T1	E10	104
Cintra, A. C. O.	10	T1	E04	97	Costa, M. C. P.	8	T1	E09	110
Cisneros, J. I.	9	T1	E03	378	Costa, M. C. P.	10	T1	E02	54
Claro, F.	10	T1	E13	338	Costa, M. V. T.	10	T1	E12	234
Coaquira, J. A. H.	8	T1	E01	65	Costa, R. A. L.	8	T1	E09	112
Coelho Neto, J. A.	9	M2	04	284	Costa, S. C.	8	T1	E12	211
Coelho Neto, J. A.	9	M1	04	284	Costa, U. M. de S.	9	M1	12	114
Coelho, A. A.	9	T1	E09	223	Costa, V. C.	10	T1	E09	144
Coelho, F. O.	9	T1	E12	121	Couce, M. D.	10	T1	E04	95
Coelho, L. F. de S.	10	M2	01	25	Courrol, L. C.	10	T1	E03	83
Cohen, A. M.	8	M2	13	301	Courrol, L. C.	8	M1	08	60
Cohenca, C. H.	8	T1	E04	353	Coutinho-Filho, M. D.	10	T1	E09	144
Coleridge, P. T.	10	M2	13	334	Coutinho-Filho, M. D.	9	T1	E10	358
Colombo, M.	8	M2	03	37	Coutinho-Filho, M. D.	9	M2	09	219
Colussi, V. C.	9	M2	03	47	Coutinho, K.	8	M2	04	350
Comedi, D.	9	M2	08	70	Coutinho, S.	10	T1	E09	143
Comedi, D.	10	T1	E13	341	Coutinho, S.	10	T1	E09	144
Constantino, C.	10	T1	E13	338	Coutinho, S.	8	M2	12	100
Constantino, C. J. L.	8	M1	11	267	Coutinho, S.	8	T1	E09	109
Continentino, M. A.	8	T1	E12	212	Coutinho, S.	10	T1	E09	145
Continentino, M. A.	8	T1	E12	213	Coutinho, S.	10	T1	E10	137
Continentino, M. A.	9	T1	E11	118	Cowache, C.	10	M1	09	227
Continentino, M. A.	9	T1	E10	355	Craco, L.	8	T1	E12	209
Continentino, M. A.	8	M1	09	206	Craievich, A.	9	M1	07	187
Corat, E. J.	10	T1	E06	199	Craievich, A.	9	M1	07	188
Corat, E. J.	9	T1	E03	379	Craievich, A.	9	M1	07	187
Corat, E. J.	10	M1	06	382	Craievich, A.	8	T1	E07	248
Cordeiro, C. E.	9	T1	E12	122	Craievich, A. F.	10	T1	E04	96
Correa Filho, J. A.	9	T1	E13	322	Craievich, A. F.	10	T1	E04	96
Correa Filho, J. A.	9	T1	E13	330	Crestana, S.	9	T1	E05	156
Correia, A. L.	9	M2	05	154	Crestana, S.	10	M1	11	296
Correia, R. R. B.	8	T1	E07	247	Crestana, S.	9	T1	E05	159
Cortezao, S. U.	10	T1	E03	83	Cruvinel, P. E.	9	T1	E05	157
Costa Filho, A. J. da	9	T1	E07	288	Cruvinel, P. E.	9	T1	E05	157
Costa Filho, R. N. da	9	T1	E13	325	Cruz, C. H. B.	8	M1	02	240
Costa Filho, R. N. da	10	T1	E13	343	Cruz, C. H. B.	8	T1	E07	248
Costa Filho, R. N. da	10	T1	E13	343	Cruz, C. H. de B.	9	M2	13	319
Costa Jr, A. T. da	10	T1	E12	233	Cruz, F. C. da	9	T1	E08	21
Costa Jr, M. da	10	T1	E12	230	Cruz, H. R. da	10	M2	06	385

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Cruz, J. M. R.	8	T1	E07	249	Dawson, K.	9	T1	E12	121
Cruz, L. R. de O.	9	T1	E06	190	De La Rosa-Fox, N.	9	M1	07	187
Cruz, N. C. da	9	T1	E03	377	De-Paoli, M. A.	8	M1	11	267
Cruz, N. C. da	9	T1	E03	380	Decastro, S. C.	8	T1	E03	367
Csanak, G.	10	T1	E08	31	Decastro, S. C.	8	T1	E03	372
Cuevas, R. F.	10	T1	E03	81	Degani, M. H.	8	T1	E13	306
Cuevas, R. F.	10	M1	08	77	Degani, M. H.	8	T1	E13	307
Cuevas, R. F.	8	T1	E01	64	Degani, M. H.	9	T1	E13	322
Cuevas, R. F.	8	M1	08	60	Degani, M. H.	8	T1	E13	308
Cunha, C.	9	T1	E02	276	Degani, M. H.	8	T1	E13	309
Cunha, H. N. da	9	M1	11	271	Degani, M. H.	8	T1	E13	315
Cunha, J. B. M. da	9	M1	07	185	Degreve, L.	10	T1	E09	145
Cunha, J. B. M. da	8	T1	E03	367	Degreve, L.	10	T1	E10	136
Cunha, J. B. M. da	8	T1	E03	367	Del Tredici, S. D.	10	T1	E07	260
Cunha, S. F. da	10	T1	E12	234	Delben, A. A. S. T.	10	T1	E06	199
Cunha, S. F. da	8	T1	E12	214	Delben, J. R. J.	10	T1	E06	199
Cunha, S. F. da	9	T1	E09	223	Demenicis, L. da S.	10	T1	E13	342
Cunha, S. F. da	8	M2	09	208	Demenicis, L. da S.	10	T1	E13	342
Cunha, S. L. S.	8	T1	E07	247	Denardin, J. E.	9	T1	E05	157
Curado, E. M. F.	10	T1	E09	144	Denicolo, I.	9	M2	07	189
Curado, E. M. F.	8	T1	E09	106	Desert, A.	10	M2	08	79
Curado, E. M. F.	8	T1	E09	106	Destro, M. A. F.	9	T1	E03	376
Curado, E. M. F.	10	T1	E09	143	Destro, M. G.	10	T1	E07	260
Curilef, S.	9	T1	E12	123	Destro, M. G.	10	T1	E07	260
Curvello, A. A. S.	8	M1	11	267	Devreese, J. T.	8	M2	13	302
Cury, L. A.	10	M2	13	334	Diamand, M.	8	M2	05	244
Cusatis, C.	8	M1	10	86	Diarte, M. A. C.	9	T1	E07	292
Cusatis, C.	8	M1	10	85	Dias Filho, J. H.	9	T1	E09	226
Custodio, M. C. C.	9	M2	08	70	Dias, I. F. L.	9	T1	E05	156
Cvintal, T.	9	M1	05	153	Dias, I. F. L.	10	T1	E13	346
D'Aguiar Neto, M. M. F.	9	T1	E06	190	Diaz, C.	8	T1	E04	351
D'ajello, P. C. T.	9	M2	06	374	Diaz, M. P.	8	T1	E01	67
D'Almeida, F. M. R.	8	T1	E04	350	Dickstein, F.	9	T1	E03	380
Dacal, L. C. O.	8	T1	E03	370	Dieny, B.	10	M1	09	227
Dallavalli, M. J.	10	T1	E08	26	Dieny, B.	10	M1	09	227
Damasceno, O. de O.	8	M2	11	269	Dietzsch, O.	10	M1	05	160
Damasceno, O. de O.	9	T1	E10	359	Dietzsch, O.	8	T1	E05	150
Damiao, A. J.	9	T1	E03	376	Digiacoimo, M.	9	M2	01	15
Damiao, A. J.	9	T1	E03	376	Dini, D. C.	10	M2	02	259
Damiao, J.	9	T1	E06	195	Diniz, F. B.	8	T1	E04	352
Danailov, M. B.	8	M2	02	242	Diniz, F. B.	10	T1	E11	282
Daniel, C. B.	8	M1	03	36	Diniz, I. S.	9	M2	05	154
Dantas, A. L.	10	T1	E12	232	Diniz, R.	10	T1	E06	198
Dantas, C. M. A.	9	T1	E04	255	Diniz, R. B.	10	T1	E08	28
Dantas, L. B.	9	T1	E08	20	Dionysio, M. O.	9	T1	E09	225
Dantas, S. de O.	9	T1	E02	275	Dios-Leyva, M. de	8	T1	E13	308
Dantas, S. de O.	9	M2	08	71	Djanikian, F.	10	T1	E12	238
Dardenne, L. E.	8	M2	01	5	Djanikian, F.	10	T1	E12	238
Dardenne, L. E.	8	T1	E08	10	Djanikian, F.	10	T1	E12	238
Dardenne, L. E.	8	T1	E08	10	Dohi, A.	8	M1	10	86
Davidovich, L.	10	M1	02	256	Domany, E.	9	T2	12	389
Davidovich, M. A.	8	T1	E13	311	Domingues, D. N.	8	T1	E09	111
Davidovich, M. A.	8	T1	E13	311	Domingues, P. H.	10	T1	E12	237
Davidovich, M. A.	8	M2	13	302	Domingues, P. H.	10	T1	E12	237
Davies, M.	10	M2	13	334	Dominguez, A. B.	8	M1	04	347
Dawnay, E.	9	M1	07	187	Dominguez, D. R. C.	8	T1	E09	105

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Donangelo, R.	10	T1	E08	26	Engelsberg, M.	10	M2	11	297
Donatti, D. A.	9	T1	E06	192	Engelsberg, M.	10	M2	11	298
Donatti, D. A.	9	T1	E06	192	Erichsen Jr, R.	8	M2	12	100
Donatti, D. A.	9	T1	E06	192	Eschiapati-Ferreira, M. A.	10	T1	E08	26
Donoso, J. P.	9	T1	E07	289	Espinoza, J. L. U.	8	T1	E13	311
Donoso, J. P.	9	T1	E07	292	Esquivias, L.	9	M1	07	187
Donoso, J. P.	8	M2	11	269	Esquivias, L.	9	M1	07	187
Doria, M. M.	8	M2	04	349	Etgens, V.	10	T1	E13	341
Doria, M. M.	8	T1	E04	350	Eto, R. F.	8	T1	E08	9
Doria, R. M.	8	T1	E04	354	Evangelista, L. R.	9	M1	10	167
Dotto, M. E. R.	8	T1	E06	183	Evangelista, L. R.	10	T1	E03	172
Drago, V.	9	T1	E03	375	Evangelista, L. R.	9	M2	10	169
Drigo Filho, E.	10	T1	E02	57	Evangelista, L. R.	9	T1	E12	125
Drummond, E.	9	T1	E13	329	Fabbri, M.	9	T1	E01	72
Duarte, J. L.	9	T1	E05	156	Fagotto, E. A. de M.	10	M2	13	333
Duarte, J. L.	10	T1	E13	346	Fagundes, A.	10	T1	E06	202
Duarte, M.	8	T1	E01	65	Fajardo, F.	9	M2	08	70
Duarte, M.	10	M1	08	77	Fajardo, F.	10	T1	E13	341
Dumke, V. R.	9	T1	E06	191	Falicov, L.	10	T2	02	389
Dunn, J. D.	10	T1	E13	344	Falicov, L. M.	10	M2	09	228
Duran, J. E.	9	M2	03	46	Fantini, M. C. A.	8	M2	10	88
Duran, J. E. R.	9	M2	03	47	Fantini, M. C. A.	10	T1	E05	91
Durrant, S. F.	9	T1	E03	377	Fantini, M. C. A.	10	T1	E05	91
Durrant, S. F.	9	M2	08	71	Fardad, M.	9	M1	07	187
Durrant, S. F.	9	T1	E03	380	Farenzena, L. S.	10	T1	E11	279
Durr, J.	8	M1	10	87	Faria, C. C. de	9	T1	E09	222
Durr, J.	8	M1	10	86	Faria, C. F. de M.	9	M1	01	13
Eaves, L.	10	M2	13	335	Faria, C. F. de M.	9	T1	E08	18
Ebe, A.	8	T1	E03	370	Faria, J. G. P. de	8	M2	11	269
Edmonds, D. T.	10	M2	11	298	Faria, N. V. de C.	10	M1	01	23
Eduardo, C. de P.	9	M2	03	47	Faria, R.	8	M2	11	268
Eduardo, C. de P.	9	M1	05	152	Faria, R. M.	10	T1	E11	281
Edwards, G.	9	T1	E13	330	Faria, R. M.	9	M1	11	271
Egert, P.	9	T1	E08	22	Faria, R. M.	9	T1	E02	274
Eiras, J.	10	T1	E03	82	Faria, R. M.	10	M1	11	295
Eiras, J. A.	9	T1	E06	191	Faria, R. M.	9	M1	11	270
Eiras, J. A.	8	M2	08	62	Faria, R. M.	10	T1	E11	282
Eiras, J. A.	10	T1	E03	81	Faria, R. M.	9	M2	04	285
Eiras, J. A.	10	T1	E03	82	Faria, R. M. de	10	T1	E05	93
Eiras, J. A.	10	T1	E06	200	Farias, G. A.	9	T1	E13	326
Eiras, J. A.	10	M2	08	79	Farias, G. de A.	8	T1	E12	213
Eleuterio Filho, S.	9	T1	E01	73	Farias, G. de A.	9	T1	E13	325
Ellis, D.	8	M2	09	208	Farias, G. de A.	8	M2	13	302
Elmassalami, M.	9	T1	E10	355	Farias, G. de A.	10	M2	06	384
Elmassalami, M.	9	T1	E10	355	Farias, G. de A.	8	T1	E13	312
Elmassalami, M.	8	T1	E04	352	Farias, G. de A.	10	T1	E13	343
Elmassalami, M.	10	T1	E12	237	Farias, P. C. M.	10	T1	E13	336
Elmassalami, M.	8	M1	04	347	Farnetane Neto,	10	T1	E03	175
Elmassalami, M.	8	T1	E12	216	Faschinger, W.	9	M2	08	69
Elmassalami, M.	8	T1	E12	217	Favoretto, M.	8	T1	E13	305
Emerich, F.	9	T1	E06	193	Fazzio, A.	9	M1	02	318
Emmel, P. D.	9	T1	E13	328	Fazzio, A.	8	T1	E08	7
Emmel, P. D.	10	M1	13	332	Fazzio, A.	8	M2	06	365
Emura, M.	9	T1	E09	225	Fazzio, A.	9	T1	E13	327
Enderlein, R.	9	T1	E13	325	Fazzio, A.	8	M2	04	350
Enderlein, R.	9	T1	E13	329	Fazzio, A.	10	T1	E13	336

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Feitosa, E.	10	T1	E02	56	Figueiredo Neto, A. M.	9	M1	10	167
Feitosa, E.	10	T1	E02	57	Figueiredo Neto, A. M.	10	T1	E03	173
Feldmann, G.	9	T1	E09	224	Figueiredo Neto, A. M.	10	T1	E03	174
Feldman, R. D.	10	T1	E13	338	Figueiredo Neto, A. M.	9	M2	10	169
Fernandes, A. A. R.	9	T1	E07	287	Figueiredo Neto, A. M.	10	T1	E03	174
Fernandes, A. A. R.	8	T1	E06	184	Figueiredo Neto, A. M.	10	T1	E03	174
Fernandes, A. O.	10	T1	E13	341	Figueiredo Neto, A. M.	8	M1	01	165
Fernandes, A. S.	10	T1	E09	141	Figueiredo Neto, J. M. de	8	T1	E10	102
Fernandes, J. C.	8	M1	09	206	Figueiredo, J. M. A.	9	M2	12	115
Fernandes, R. M.	8	T1	E06	181	Figueiredo, W.	10	T1	E10	133
Ferraz, A.	9	M2	09	220	Figueiredo, W.	10	T1	E10	133
Ferraz, A. C.	9	T1	E13	320	Figueiredo, W.	8	T1	E10	102
Ferraz, A. C.	9	T1	E13	320	Figueiredo, W.	9	T1	E11	117
Ferraz, A. C.	9	T1	E13	321	Figueiredo, W.	9	T1	E12	124
Ferraz, A. C.	9	M1	02	317	Figueiredo, W.	10	T1	E09	142
Ferraz, A. C.	9	T1	E13	321	Figueiredo, W.	9	T1	E12	127
Ferraz, A. C.	8	T1	E03	369	Fittipaldi, I. P.	8	T1	E10	104
Ferraz, A. C.	9	T1	E13	327	Fittipaldi, I. P.	8	T1	E10	104
Ferraz, M. C.	10	T1	E06	197	Fittipaldi, I. P.	9	T1	E11	118
Ferraz, M. C.	10	T1	E06	198	Flemming, J.	9	T1	E08	19
Ferreira Neto, S. J.	10	M1	12	127	Flemming, J.	9	M1	01	13
Ferreira, B.	10	T1	E06	202	Florencio Jr, J.	8	M2	06	366
Ferreira, C. L.	9	T1	E07	287	Florencio, O.	8	T1	E06	181
Ferreira, E. C.	9	T1	E13	326	Florencio, O.	8	T1	E06	181
Ferreira, G. F. L.	9	T1	E02	272	Florentino, A.	8	T1	E03	369
Ferreira, G. F. L.	8	M2	11	268	Florentino, A. de O.	8	T1	E04	351
Ferreira, G. M.	9	T1	E04	256	Flores, W. H.	8	T1	E03	367
Ferreira, J. M.	8	T1	E04	352	Flores, W. H.	8	T1	E03	367
Ferreira, J. M.	8	M1	04	348	Florez, A.	10	M2	02	259
Ferreira, J. M.	8	T1	E04	353	Foerster, B.	10	M1	11	296
Ferreira, J. M.	8	T1	E04	353	Foerster, C. E.	8	M2	07	179
Ferreira, J. V. B.	9	T1	E13	322	Foerster, C. E.	8	M2	07	180
Ferreira, J. V. B.	8	T1	E13	309	Foglio, M. E.	9	T1	E12	121
Ferreira, J. V. B.	8	T1	E13	315	Foglio, M. E.	9	M2	09	219
Ferreira, L. G.	10	M2	01	24	Fonseca, A. L. A.	10	T1	E07	264
Ferreira, L. G.	8	T1	E08	7	Fonseca, A. L. de A.	8	T1	E08	10
Ferreira, M.	10	T1	E11	279	Fonseca, P. de T.	8	T1	E05	148
Ferreira, M. M. da V.	10	M1	05	160	Fonseca, P. de T.	8	T1	E05	148
Ferreira, N. G.	10	M1	06	383	Fonseca, P. de T.	8	T1	E05	148
Ferreira, N. G.	8	M2	05	241	Fontaine, A.	10	M1	09	227
Ferreira, V.	9	T1	E01	75	Fontanari, J. F.	8	M1	12	98
Ferreira, W. B.	10	T1	E03	176	Fontanini, S.	9	M1	10	167
Ferreira, W. P.	9	T1	E06	194	Fontes, M. B.	9	T1	E09	221
Ferreira, W. S.	9	T1	E05	157	Fontes, M. B.	8	T1	E04	352
Ferrell, W. R.	8	T1	E03	368	Fontes, M. B.	8	T1	E12	216
Ferreyra, J.	8	M2	13	302	Fontes, M. B.	8	T1	E12	217
Ferri, P. H.	10	T1	E04	96	Fontes, M. R. M.	10	M1	03	49
Fert, A.	10	M2	09	229	Forker, M.	8	M2	08	62
Fichtner, P. F. P.	10	T1	E08	32	Forker, M.	8	M2	08	61
Fichtner, P. F. P.	10	M1	06	382	Fornes, J. A.	10	T1	E02	55
Fiedler-Ferrara, N.	10	T1	E10	131	Forno, A. de O. D.	8	T1	E13	312
Figueira, D. S. S.	9	T1	E10	358	Foschini, C. R.	10	T1	E06	198
Figueira, M.	9	M1	07	185	Fossey, M. A.	10	T1	E02	55
Figueira, M. S.	9	T1	E12	121	Fraga, E. S.	9	T1	E02	276
Figueira, M. S.	9	M2	09	219	Fragalli, J. F.	10	T1	E13	335
Figueiredo Neto, A. D. de	10	T1	E08	31	Fragalli, J. F.	9	T1	E03	375

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Fragalli, J. F.	9	T1	E03	375	Fries, S. G.	8	M1	07	178
Fragalli, J. F.	10	T1	E13	345	Fries, S. G.	8	M1	07	177
Fragnito, H.	9	M2	13	319	Frnazan, A. H.	9	T1	E01	73
Fragnito, H. L.	8	M1	02	240	Frota-Pessoa, S.	8	T1	E12	214
Fragnito, H. L.	10	M2	05	162	Frota-Pessoa, S.	8	T1	E12	214
Fragnito, H. L.	8	M1	02	239	Frota-Pessoa, S.	8	T1	E03	369
Fragnito, H. L.	8	T1	E07	248	Fujimoto, F.	8	T1	E03	370
Fraguas, G. B.	8	T1	E05	148	Fujimoto, J. G.	8	M2	02	242
Fraguas, G. B.	8	T1	E05	148	Fujimoto, M. M.	10	T1	E08	28
Fraguas, G. B.	9	M2	05	154	Fujimoto, M. M.	10	T1	E08	29
Fraguas, G. B.	10	M1	05	160	Fujimoto, M. M.	10	T1	E08	30
Franca, F.	9	T1	E09	220	Fujita, A.	10	T1	E12	236
Francisco, R. H. P.	8	T1	E06	181	Fulco, P.	10	M1	13	332
Franco, B. J. de O.	10	M2	10	90	Furquim, T. A. C.	8	T1	E02	41
Franco, B. J. de O.	10	T1	E05	92	Furquim, T. A. C.	8	T1	E02	43
Franco, R. W. de A.	9	T1	E07	290	Furtado, C.	9	T1	E13	329
Franzan, A. H.	9	T1	E01	73	Furtado, C.	9	T1	E13	330
Franzan, A. H.	8	T1	E06	182	Furuya, K.	9	T1	E11	117
Frare, P. L.	9	T1	E07	289	Furuzawa, S. K.	9	T1	E05	159
Freire Jr, F. L.	10	M1	06	382	Gadelha, A. L.	10	T1	E09	144
Freire Jr, F. L.	10	T1	E13	344	Galkin, V. Y.	10	T1	E12	231
Freire Jr, F. L.	10	T1	E13	345	Galkin, V. Y.	8	T1	E12	212
Freire Jr, F. L.	10	M1	06	382	Gallo, N. J. H.	9	T1	E01	72
Freire Jr, F. L.	8	M1	06	363	Galvao, D. S.	9	M2	08	71
Freire, J.	9	M1	07	185	Galvao, D. S.	9	T1	E02	275
Freire, P. de T. C.	9	T1	E06	190	Galvao, D. S.	10	T1	E11	281
Freire, R. R.	10	M1	08	78	Galvao, D. S.	10	M2	03	50
Freire, S. L. S.	9	T1	E13	324	Galvao, D. S.	9	T1	E02	276
Freire, V. N.	9	T1	E13	326	Galvao, D. S.	9	T1	E02	276
Freire, V. N.	8	M2	13	302	Galvao, D. S.	9	M1	11	270
Freire, V. N.	10	T1	E13	343	Galzerani, J. C.	9	T1	E13	322
Freire, V. N.	10	T1	E13	343	Galzerani, J. C.	8	T1	E13	308
Freire, V. N.	8	T1	E13	312	Gama, S.	9	T1	E09	221
Freire, V. N.	10	T1	E13	343	Gama, S.	10	T1	E12	230
Freire, V. N.	9	M2	12	115	Gama, S.	10	T1	E12	233
Freitas Neto, U.	9	M2	01	14	Gama, S.	9	T1	E09	223
Freitas, A. D.	10	T1	E09	145	Gama, S.	8	M1	04	348
Freitas, D. de	10	T1	E06	202	Gama, S.	8	M1	09	206
Freitas, D. S.	8	T1	E07	247	Gama, S.	8	M1	07	178
Freitas, J. C. C. de	10	M1	11	296	Gama, S.	8	M1	07	177
Freitas, J. C. C. de	10	M1	11	295	Gamba, Z.	10	T1	E09	144
Freitas, R. F. de S.	9	M1	11	271	Gameiro, C. C.	8	T1	E04	353
Freitas, W. A. de	8	T1	E06	181	Gandra, F. C. G.	8	T1	E05	149
Frejlich, J.	9	T1	E01	72	Gandra, F. C. G.	9	M2	09	218
Frejlich, J.	8	M2	05	242	Gandra, F. C. G.	9	T1	E06	193
Frejlich, J.	9	T1	E04	254	Garavelli, S. L.	9	M2	09	220
Frejlich, J.	8	M2	05	242	Garcia, A. M.	10	T1	E04	94
Frejlich, J.	8	M2	05	241	Garcia, C. R. S.	10	T1	E07	261
Frejlich, J.	9	T1	E04	255	Garcia, D.	10	M2	08	79
Freschi, A. A.	8	M2	05	242	Garcia, F.	10	T1	E12	234
Freschi, A. A.	9	T1	E04	254	Garcia, G. de A.	10	M2	01	24
Freschi, A. A.	8	M2	05	242	Garcia, G. de A.	10	T1	E08	27
Freund, M. T. L.	8	T1	E02	42	Garcia, P. M.	8	M2	05	242
Freund, M. T. L.	8	M2	03	38	Garcia, P. M.	9	T1	E04	254
Freund, M. T. L.	8	T1	E02	44	Garcia, P. M.	8	M2	05	242
Frichembruder, M.	10	M1	12	128	Garcia, S.	8	T1	E04	351

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Garcia, S.	9	T1	E10	355	Gomes, A. S. L.	9	M1	13	250
Garcia, V. H.	10	T1	E12	230	Gomes, L.	10	T1	E03	83
Garg, V. K.	9	T1	E06	194	Gomes, L.	8	M1	08	60
Garland, M. T.	10	T1	E04	94	Gomes, L.	10	T1	E03	83
Garlip, W.	8	T1	E06	180	Gomes, M. A. F.	10	T1	E10	130
Garratt, R.	10	T1	E04	97	Gomes, M. A. F.	8	T1	E13	314
Garratt, R.	10	M1	03	49	Gomes, M. A. F.	9	M2	12	115
Gaub, H. E.	9	T2	13	388	Gomes, O. A.	8	T1	E08	7
Gavilano, J. L.	8	T1	E12	216	Gomes, O. A.	8	T1	E08	11
Gel'mukhanov, F.	9	M2	01	15	Gomes, U. U.	9	M1	07	185
Gennser, U.	8	M2	13	301	Gomes, U. U.	10	T1	E06	202
Gennser, U.	8	T1	E13	303	Gomide, J. V. B.	10	M2	01	24
Gennser, U.	8	T1	E13	303	Gomide, J. V. B.	10	T1	E08	27
Gennser, U.	8	T1	E13	304	Gomide, J. V. B.	10	T1	E07	260
Gennser, U.	8	T1	E13	313	Goncalves, G. R. R.	10	T1	E03	170
Geraldo, J. M.	9	T1	E13	322	Goncalves, L. L.	8	T1	E10	104
Geraldo, J. M.	10	T1	E13	339	Goncalves, L. L.	8	T1	E10	105
Germano, J. S. E.	10	T1	E08	26	Goncalves, L. L.	8	T1	E10	105
Germano, J. S. E.	10	T1	E08	27	Goncalves, L. L.	8	T1	E08	11
Germano, J. S. E.	10	M2	01	24	Goncalves, L. L.	9	T1	E11	118
Ghafari, M.	9	T1	E09	223	Goncalves, L. L.	9	T1	E12	126
Ghiner, A. V.	10	M2	13	334	Goncalves, S.	9	M2	12	115
Ghiner, A. V.	9	M2	02	252	Goncalves, W. M.	9	T1	E07	288
Ghiner, A. V.	9	M2	02	252	Goncalves, W. M.	9	T1	E07	288
Ghivelder, L.	9	T1	E10	356	Goncalves, W. M.	9	T1	E07	289
Ghivelder, L.	10	M2	04	361	Goncalves, W. M.	10	T1	E10	135
Giacometti, J. A.	9	M2	11	272	Goncalves, W. M.	10	T1	E10	135
Giacometti, J. A.	9	M1	11	271	Goncalvez, R. D.	10	T1	E06	203
Giansante, M.	8	M2	02	244	Gondar, J. L.	9	T1	E03	380
Giansante, M.	10	T1	E07	262	Gonzalez, C. E.	10	M2	11	298
Gibaud, A.	10	M2	08	79	Gonzalez, C. E.	10	M2	11	298
Giglio, R.	10	T1	E04	97	Gonzalez, O.	10	T1	E04	94
Giles, C.	8	M1	10	86	Gonzalez, P. P.	10	T1	E13	341
Gillet, J. A.	10	M2	11	299	Gonzalez, Y.	10	T1	E04	94
Gilliland, G. D.	10	M1	13	331	Gorenstein, A.	8	M2	10	88
Jimenes, J. A. S.	8	T1	E06	183	Gorenstein, A.	8	T1	E01	64
Giocondo, M.	9	M2	10	169	Gouveia-Neto, A. da S.	8	T1	E07	245
Giordanengo, B.	9	T1	E10	355	Gouveia-Neto, A. da S.	8	T1	E07	246
Giordanengo, B.	8	T1	E04	352	Gouveia-Neto, A. da S.	9	T1	E04	256
Giordanengo, B.	8	T1	E12	217	Gouveia-Neto, A. da S.	10	T1	E07	266
Giordanengo, B. G. H.	8	M1	04	347	Gouveia-Neto, A. S.	8	T1	E07	247
Giotto, M. T. S.	10	T1	E04	97	Gouveia-Neto, A. S.	10	M2	02	259
Giotto, M. V.	10	M1	11	295	Gouveia-Neto, A. S.	8	T1	E07	248
Giraldi, M. T. M. R.	10	M2	05	163	Gouveia-Neto, A. S.	8	M2	02	242
Gisin, N.	8	M2	02	244	Gouveia-Neto, A. S.	9	M1	13	250
Gisin, N.	8	M1	02	240	Gouveia, E. A.	8	T1	E07	247
Giuliano, A. D.	9	T1	E05	156	Gouveia, E. A.	10	M2	02	259
Gobbi, A. L.	10	T1	E07	262	Gouveia, E. A.	8	T1	E07	248
Godinho, C. F. de L.	10	T1	E08	32	Gouveia, E. J. T. de A.	8	T1	E07	245
Goldman, C.	10	M2	03	50	Gouveia, E. J. T. de A.	10	T1	E07	266
Goldman, C.	10	T1	E09	141	Goya, A.	10	T1	E07	264
Gomes Junior, S. R.	8	T1	E09	111	Graeff, M. S. Z.	8	T1	E05	148
Gomes, A. M. de S.	8	T1	E05	152	Graeff, M. S. Z.	8	T1	E05	148
Gomes, A. S. L.	10	M2	02	258	Granado, E.	10	T1	E04	96
Gomes, A. S. L.	8	T1	E07	246	Grande, P. L.	10	T1	E08	27
Gomes, A. S. L.	10	M2	02	259	Grande, P. L.	10	M2	01	24

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Grandi, B. C. S.	9	T1	E12	127	Hallen, A.	10	T1	E11	279
Grandini, C. R.	8	T1	E06	181	Hamburger, A. I.	8	T1	E09	110
Grandini, C. R.	8	T1	E06	181	Hamm, R. A.	10	M1	13	331
Grandini, C. R.	8	M2	07	178	Hansen, A.	9	T1	E11	116
Grandini, C. R.	8	M2	07	179	Hansen, A.	9	T1	E11	116
Grandi, T. A.	9	M2	07	189	Harriot, L. R.	10	M1	13	331
Grella, L.	10	M1	08	78	Hasenack, A. C.	10	T1	E10	134
Grieneisen, H. P.	8	T1	E03	369	Hauser, P. R.	10	T1	E10	138
Grimsditch, M.	9	T1	E06	193	Hawrylak, P.	10	M1	13	333
Gross, B.	9	T1	E06	195	Hayashi, M. A.	9	T1	E01	72
Guedes, G.	10	M1	05	161	Helman, J. S.	8	T1	E12	209
Guedes, G.	8	M1	10	87	Helman, J. S.	9	T1	E07	286
Guedes, I.	9	T1	E08	18	Henini, M.	10	M2	13	335
Guedes, I.	9	T1	E08	19	Henriques, A.	8	M1	03	36
Guenzburger, D.	8	M2	09	208	Henriques, A. B.	8	M2	13	301
Guenzburger, D.	8	T1	E08	7	Henriques, A. B.	8	T1	E13	314
Guenzburger, D.	8	M2	01	5	Henriques, E. F.	9	T1	E12	125
Guenzburger, D.	8	T1	E08	8	Henriques, E. M.	10	M1	05	160
Guimaraes Neto, J. M.	9	M1	11	270	Henriques, V. B.	9	T1	E12	125
Guimaraes, A. P.	9	T1	E09	221	Henriques, V. B.	10	T1	E02	55
Guimaraes, A. P.	8	T1	E12	211	Henriques, V. B.	9	T1	E12	125
Guimaraes, A. P.	10	T1	E12	232	Henriques, V. B.	10	T1	E02	53
Guimaraes, A. P.	10	T1	E12	234	Henriques, V. B.	10	T1	E02	56
Guimaraes, A. P.	10	T1	E12	235	Henry, J. Y.	10	M2	11	299
Guimaraes, A. P.	8	T1	E05	150	Herberts, M. R.	10	T1	E08	32
Guimaraes, A. P.	9	T1	E09	225	Hernandes, A. C.	9	M2	04	285
Guimaraes, A. P.	8	T1	E12	216	Hernandes, A. C.	9	T1	E01	72
Guimaraes, A. P.	8	T1	E12	217	Hernandes, A. C.	9	M2	04	285
Guimaraes, B. G.	10	T1	E04	95	Hernandes, A. C.	8	M2	08	61
Guimaraes, F.	10	T1	E13	336	Hernandes, A. C.	9	T1	E01	74
Guimaraes, F. E. G.	10	T1	E13	345	Hernandes, A. C.	9	M2	08	70
Guimaraes, P. S. S.	8	T1	E13	305	Hernandes, A. C.	9	T1	E01	74
Guimaraes, P. S. S.	8	T1	E13	306	Hernandes, A. C.	9	M1	08	68
Guimaraes, P. S. S.	8	T1	E13	316	Hernandes, C. S.	8	T1	E13	314
Guimaraes, R. B.	8	M1	09	206	Herzfeld, J.	10	T2	13	391
Guo, R.	8	M2	08	61	Hessel, R.	9	T1	E02	272
Gupta, R.	9	M2	01	14	Hessel, R.	9	T1	E06	195
Gupta, R.	9	T1	E08	21	Hibler, I.	10	T1	E03	172
Gurgel, J.	9	M1	05	153	Hickmann, J. M.	10	M2	02	259
Gusev, G.	8	T1	E13	309	Hickmann, J. M.	8	T1	E07	248
Gusev, G. M.	8	M2	13	301	Hickmann, J. M.	10	T1	E07	266
Gusev, G. M.	8	T1	E13	303	Hintz, E.	10	T1	E07	266
Gusev, G. M.	8	T1	E13	303	Hipolito, O.	8	T1	E13	306
Gusev, G. M.	8	T1	E13	304	Hipolito, O.	8	T1	E13	307
Gusev, G. M.	8	T1	E13	304	Hipolito, O.	8	T1	E13	308
Gusev, G. M.	10	M2	13	334	Hipolito, O.	8	T1	E13	310
Gusev, G. M.	8	T1	E13	313	Hipolito, O.	8	T1	E13	310
Gusev, G. M.	8	T1	E13	316	Hipolito, O.	9	T1	E13	327
Gusmao, M. A. C.	8	T1	E12	209	Hirata, J. H.	10	M1	05	160
Gusmao, M. A. C.	8	T1	E12	210	Holanda, J. N. F. de	10	T1	E06	202
Gusmao, M. A. C.	8	T1	E12	210	Honjales, E.	10	T1	E04	97
Gusmao, M. A. C.	8	T1	E12	211	Horjales, E.	10	M1	03	49
Guzman, A. M.	9	T1	E05	155	Hornos, J. E. M.	8	T2	12	387
Haetinger, C. M.	8	T1	E05	149	Hornos, Y. M. M.	8	T2	12	387
Hai, G.	8	M2	13	302	Horowitz, F.	9	M1	07	187
Hakkarainen, T.	9	T1	E01	73	Horowitz, F.	10	T1	E07	263

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Horvatic, M.	10	M2	11	299	Jesus, E. F. O. de	9	T1	E07	289
Hoyos, F. J. de	10	T1	E12	230	Jesus, E. F. O. de	9	T1	E07	291
Hubler, R.	9	M2	06	374	Jesus, E. F. O. de	9	T1	E07	291
Hummel, D. C. A.	9	M1	07	187	Joannopoulos, J.	9	T1	E13	321
Hurd, T.	9	M1	12	113	Joannopoulos, J. D.	9	M1	02	318
Iannarella, L.	9	T1	E09	221	Joannopoulos, J. D.	9	T1	E13	329
Iglesias, J. R.	9	M2	12	115	Jordao, J. A. R.	8	T1	E06	181
Iikawa, F.	10	M1	13	332	Jordao, J. A. R.	8	T1	E06	181
Iikawa, F.	10	T1	E13	340	Juliani, L. P.	8	M1	11	267
Iikawa, M. A. C. F.	10	M1	13	331	Juliano, L.	8	T1	E02	39
Imasato, H.	10	M1	11	297	Juliao, J. F.	8	T1	E01	64
Imasato, H.	8	T1	E02	40	Juliao, J. F.	9	T1	E06	194
Imasato, H.	8	T1	E02	43	Junior, E. F. da S.	10	M2	13	335
Impinnisi, P. R.	10	M2	02	259	Junior, E. F. da S.	8	T1	E13	314
Inacio, E. C.	10	T1	E05	92	Jurado, S. G.	9	T1	E10	356
Inacio, F. de A.	9	T1	E09	221	Juraitis, K. R.	9	T1	E05	156
Isejima, M. E.	8	M2	09	208	Juunior, J. S. A.	9	T1	E06	194
Isotani, S.	10	M1	05	162	Kalinowski, H. J.	9	T1	E05	155
Ito, A. S.	9	M1	03	45	Kampf, N.	9	T1	E09	226
Ito, A. S.	8	T1	E02	39	Kanda, D. H. F.	9	T1	E02	273
Ito, A. S.	10	M2	03	50	Kaschny, J. R. de A.	10	T1	E11	281
Ito, A. S.	8	T1	E02	41	Kawamura, M. R. D.	8	T1	E02	41
Ito, A. S.	8	T1	E02	42	Kawase, L. R.	10	T1	E07	265
Ito, A. S.	8	T1	E02	43	Kellermann, G.	10	T1	E04	96
Ito, A. S.	10	M2	03	51	Keller, W. A.	10	T1	E05	93
Ito, A. S.	8	T1	E02	44	Kenyon, A. J.	10	T1	E11	280
Itri, R.	8	M2	10	88	Kes, P. H.	8	M1	04	347
Itri, R.	10	T1	E03	170	Kes, P. H.	10	M1	04	360
Itri, R.	9	M1	10	168	Kim, J. I.	9	T1	E11	120
Iulek, J.	10	T1	E04	94	Kimmich, R.	9	T1	E07	293
Izatt, J. A.	8	M2	02	242	Kinouchi, O.	8	T1	E09	108
Izzo, D.	10	M2	12	130	Kintop, J. A.	8	M2	01	6
Izzo, D.	8	T1	E10	101	Kirichek, O. I.	10	M2	06	384
Izzo, D.	9	T1	E06	195	Kirtman, B.	8	T1	E08	9
Jackson, R. A.	8	T1	E01	66	Kirtman, B.	9	T1	E02	277
Jacobsohn, L. G.	10	M1	08	78	Kishore, R.	8	T1	E13	306
Jacques, S.	8	T2	02	385	Kivimaki, A.	9	T1	E08	20
Jacques, S. L.	8	T2	02	385	Kivimaki, A.	9	T1	E08	20
Jalbert, G.	10	M2	01	25	Kivimaki, A.	9	M2	01	15
Jalbert, G.	10	T1	E08	26	Kivimaki, A.	9	T1	E08	21
Janssen, T.	10	M1	10	89	Kiyohara, P. K.	8	T1	E05	150
Japiassu, G. M.	8	T1	E12	212	Kleiman, G. G.	8	T1	E03	367
Japiassu, G. M.	8	T1	E12	213	Kleiman, G. G.	8	T1	E03	372
Jaquet, J. C.	10	M2	09	229	Kleinke, M. U.	10	T1	E13	338
Jardim, R. F.	8	M1	09	206	Klem, J.	10	M1	13	331
Jardim, R. F.	8	M1	04	348	Knobel, M.	8	M2	10	88
Jardim, R. F.	8	M2	04	350	Knobel, M.	9	M2	07	188
Jardim, R. F.	8	M1	04	347	Kock, A.	8	T1	E13	312
Jardim, R. F.	9	T1	E10	357	Koide, K.	10	M1	05	160
Jardim, R. F.	8	T1	E04	353	Koide, K.	8	T1	E05	150
Jardim, R. F.	10	T1	E06	202	Koiller, B.	9	M1	02	318
Jardim, R. F.	10	T1	E06	202	Koiller, B.	9	M1	12	114
Javorsky, C. S.	8	T1	E06	183	Kokshenev, V. B.	9	M1	12	114
Jeronymo, J. M. F.	8	T1	E03	368	Kokshenev, V. B.	8	T1	E09	111
Jeronymo, J. M. F.	10	T1	E08	31	Kokshenev, V. B.	8	T1	E09	112
Jeronymo, J. M. F.	8	M2	03	38	Kokshenev, V. B.	9	T1	E11	120

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Kokshenev, V. B.	8	T1	E06	185	Leao, S. A.	8	T1	E13	309
Kolenda, J.	8	T1	E07	246	Leao, S. A.	8	T1	E13	310
Kondo, A. A.	9	M1	11	271	Leao, S. A.	8	T1	E13	310
Konzen, F.	10	M1	12	128	Leao, S. A.	8	T1	E13	315
Konzen, F.	8	M1	09	205	Leitao, U. A.	10	M2	08	79
Konzen, F.	8	T1	E12	216	Leitao, U. A.	10	T1	E03	80
Kopelevich, Y.	8	M1	04	348	Leitao, U. A.	8	M1	09	205
Kopelevich, Y.	9	T1	E10	355	Leitao, U. A.	9	T1	E05	157
Kopelevich, Y.	10	M2	04	362	Leitao, U. A.	8	T1	E12	216
Krause, J. C.	9	T1	E09	220	Leite Filho, C. V. de B.	8	T1	E03	371
Krebs, P. R.	8	T1	E09	110	Leite Filho, C. V. de B.	10	M2	06	384
Kremer, G. M.	10	T1	E09	141	Leite Filho, C. V. de B.	8	M2	03	38
Kremer, G. M.	10	T1	E09	141	Leite, C. V. B.	8	T1	E03	368
Kroin, T.	10	T1	E08	33	Leite, C. V. B.	10	T1	E08	31
Kroin, T.	10	T1	E08	33	Leite, E.	9	T1	E10	356
Kruger, E.	8	T1	E05	148	Leite, J. R.	9	T1	E13	329
Kruger, S. E.	8	T1	E06	182	Leite, J. P.	9	M2	07	189
Kryder, M. H.	10	T1	E12	236	Leite, J. R.	9	T1	E13	325
Kryder, M. H.	10	M2	09	229	Leite, J. R.	9	T1	E13	327
Kunrath, I.	9	M2	07	189	Leite, J. R.	9	T1	E13	328
Kunzler, J. V.	10	M1	04	360	Leite, J. R.	9	M2	08	70
Kurmaev, E. Z.	8	M1	04	348	Leite, J. R.	9	T1	E01	75
Kuromoto, N. K.	8	T1	E06	183	Leite, J. R. R.	8	M2	02	242
Kusmartsev, F. V.	8	T1	E13	306	Leite, K. E. V.	10	T1	E09	142
Lacerda, M. M.	8	T1	E07	245	Leite, N. F.	10	T1	E06	199
Lacerda, M. M.	8	T1	E07	248	Leite, N. F.	9	T1	E03	379
Lacerda, R. G.	8	T1	E01	64	Leite, N. F.	10	M1	06	382
Lagos, R. E.	10	T1	E10	135	Leite, N. F.	8	M1	11	268
Lagos, R. E.	9	M2	09	219	Leme, D. G.	9	T1	E03	381
Lagos, R. E.	8	T1	E12	213	Lemes, M. R.	8	T1	E08	11
Lagos, R. E.	8	T1	E12	214	Lemke, N.	8	T1	E09	106
Laks, B.	10	T1	E11	281	Lemke, N.	8	T1	E09	107
Laks, B.	10	T1	E12	238	Lemke, N.	8	T1	E09	107
Laks, B.	10	T1	E12	238	Lemos, V.	9	T1	E06	190
Laks, B.	10	T1	E12	238	Lemos, V.	9	T1	E13	323
Lambert, C. S.	10	T1	E12	233	Lepienski, C. M.	8	M2	11	268
Lancarotte, M. S.	9	T1	E09	223	Lepienski, C. M.	9	T1	E06	191
Landers, R.	8	T1	E03	367	Lesche, B.	8	T1	E07	245
Landers, R.	8	T1	E03	372	Lesche, B.	8	T1	E07	248
Landers, R.	8	M1	06	364	Lesche, B.	8	M1	02	240
Landgraf, F. J. G.	8	M2	09	207	Lesche, B.	8	T1	E07	248
Lanza, A. C.	10	M1	05	160	Lesche, B.	8	T1	E02	43
Laper, F. V.	8	T1	E08	7	Levelut, C.	10	T1	E13	344
Lappas, A.	10	T1	E12	230	Levin, A.	10	T1	E13	344
Lara, D. P.	9	T1	E12	121	Levstein, P. R.	9	T1	E07	293
Lara, M. C. F. L. e	8	M2	03	37	Libardi, H.	8	T1	E03	369
Larica, C.	9	T1	E09	225	Libero, V. L.	8	T1	E12	211
Lariucci, C.	10	T1	E04	96	Licínio, P.	10	T1	E03	80
Lasso, P. R. O.	9	T1	E07	289	Licínio, P.	10	M1	12	128
Latge, A.	8	T1	E13	307	Licínio, P.	9	M1	11	271
Latge, A.	10	T1	E13	338	Licínio, P.	10	T1	E11	280
Latge, A.	8	T1	E13	309	Licínio, P.	10	M1	10	89
Lauretto, E.	10	T1	E13	346	Lidgard, A.	10	T1	E07	265
Lavarda, F. C.	10	T1	E11	281	Li, M. S.	9	T1	E13	325
Leal, C. E.	8	T1	E12	210	Lima Junior, M. M. de	8	T1	E01	64
Leao, S. A.	9	T1	E13	322	Lima, A. P.	9	M2	08	70

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Lima, A. P.	9	T1	E01	75	Longo, E.	9	T1	E02	273
Lima, C. A. S.	10	T1	E07	263	Lopes, F. J. P.	10	T1	E02	54
Lima, C. J.	9	M2	04	285	Lopes, R. T.	9	T1	E07	289
Lima, C. J. de	9	T1	E01	74	Lopes, R. T.	9	T1	E07	291
Lima, C. J. de	9	T1	E05	159	Lopez, J. V.	8	T1	E01	63
Lima, E. G.	9	M2	02	251	Lopez, J. V.	8	T1	E01	64
Lima, E. G.	10	M1	02	257	Lorenzo Filho, O.	9	M2	01	14
Lima, E. G.	9	M2	02	251	Losch, W.	9	T1	E03	381
Lima, G. A. R.	8	M2	01	6	Lottis, D.	10	M2	09	229
Lima, I.	10	T1	E09	143	Lourenco, N. J.	8	T1	E06	183
Lima, I. C. da C.	9	T1	E13	328	Louro, S. R. W.	8	M2	03	37
Lima, I. C. da C.	10	M1	13	332	Lubyshev, D.	10	T1	E13	336
Lima, J. C. de	9	M2	07	189	Lubyshev, D.	9	T1	E13	322
Lima, J. F. de	10	T1	E03	84	Lubyshev, D.	8	T1	E13	309
Lima, J. F. de	8	T1	E01	66	Lubyshev, D.	10	T1	E13	345
Lima, J. F. de	8	M1	08	59	Lubyshev, D. I.	8	M2	13	301
Lima, J. F. de	10	T1	E06	203	Lubyshev, D. I.	8	T1	E13	303
Lima, J. F. de	8	T1	E01	66	Lubyshev, D. I.	8	T1	E13	303
Lima, J. F. de	8	T1	E01	66	Lubyshev, D. I.	8	T1	E13	304
Lima, J. P. de	9	T1	E12	126	Lubyshev, D. I.	8	T1	E13	304
Lima, J. P. de	9	T1	E12	126	Lubyshev, D. I.	10	T1	E13	337
Lima, M. A. P.	10	M2	01	24	Lubyshev, D. I.	10	T1	E13	341
Lima, M. A. P.	10	T1	E08	26	Lubyshev, D. I.	8	T1	E13	313
Lima, M. A. P.	10	T1	E08	27	Lucena, L. dos S.	8	M2	12	99
Lima, M. A. P.	10	T1	E08	28	Lucena, L. dos S.	8	T1	E09	111
Lima, M. A. P.	8	T1	E08	7	Luft, C. A.	9	T1	E03	376
Lima, M. A. P.	10	M2	01	24	Luft, C. A.	9	M2	06	374
Lima, M. B. S.	10	T1	E07	263	Luft, C. A.	9	T1	E03	376
Lima, M. C. A.	8	T1	E13	312	Lukas, H. L.	9	T1	E09	223
Lima, M. S. F.	9	M2	07	190	Lukas, H. L.	8	M1	07	178
Lima, M. S. F.	8	T1	E06	184	Lukas, H. L.	8	M1	07	177
Lima, N. F.	10	T1	E02	53	Lunazzi, J. J.	9	T1	E04	253
Lima, N. F.	10	M2	03	51	Lunazzi, J. J.	9	T1	E04	255
Lima, O. F. de	10	M2	04	361	Lunazzi, J. J.	8	M2	05	243
Lima, O. F. de	10	M2	04	362	Lunazzi, J. J.	8	M2	05	244
Lima, O. F. de	8	T1	E04	350	Luz, D. M.	10	T1	E09	143
Lima, O. F. de	9	T1	E10	354	Luz, M. G. E. da	8	T1	E08	8
Lima, O. F. de	8	T1	E04	351	Luz, M. G. E. da	8	T1	E08	8
Lima, S. J. G. de	8	M1	09	207	Luz, M. G. E. da	8	T1	E08	11
Lima, S. J. G. de	9	M2	07	189	Luz, M. G. E. da	8	T1	E08	12
Lima, W. L. C.	9	T1	E13	322	Lyra, M. L.	8	T1	E07	246
Lima, W. L. C.	9	M1	09	218	Lyra, M. L.	8	T1	E07	248
Lima, W. M.	9	T1	E03	378	Lyra, M. L.	9	T1	E04	256
Lima, W. M.	10	T1	E03	172	Macaiba, J. L. B.	10	T1	E13	339
Lima, W. M.	8	T1	E06	185	Maccari, F. R.	8	M1	10	85
Lino, A. T.	9	T1	E13	327	Macchione, E. L. A.	10	M1	05	160
Lino, A. T.	9	T1	E13	328	Macchione, E. L. A.	8	T1	E05	150
Lino, J. L. da S.	10	T1	E08	26	Maccioni, E.	10	T1	E07	260
Lino, J. L. da S.	10	T1	E08	27	Macdonald, N. C.	8	T1	E13	313
Lisboa Filho, P. N.	8	T1	E05	147	Macedo, C. V.	10	T1	E12	233
Litterst, F. J.	9	T1	E10	355	Macedo, C. V.	10	T1	E06	204
Liu, Y.	8	M2	02	242	Macedo, J. W. de P.	8	T1	E06	181
Livi, R. P.	10	T1	E11	279	Macedo, M.	10	T1	E06	199
Lobo, M. P.	10	T1	E09	140	Macedo, T. C. A.	8	M2	01	6
Lobo, R. P. S. M.	9	M1	11	270	Macedo, Z. S.	8	T1	E02	41
Lombardi Neto, F.	9	T1	E05	156	Macedo, Z. S.	8	T1	E02	43

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Macfarlane, R. M.	9	T2	09	388	Malvezzi, A. L.	9	T1	E11	120
Machado, A.	10	T1	E08	29	Mammana, A. P.	10	T1	E03	172
Machado, A. J. S.	10	T1	E06	202	Mammana, A. P.	10	T1	E03	172
Machado, A. J. S.	10	T1	E06	202	Mammana, A. P.	10	T1	E03	175
Machado, A. J. S.	10	T1	E06	202	Mammana, A. P.	10	T1	E03	176
Machado, A. M.	10	T1	E08	30	Mammana, C. I. Z.	10	T1	E03	175
Machado, A. M.	10	T1	E07	262	Mammana, C. I. Z.	10	T1	E03	172
Machado, F. B. C.	8	T1	E08	12	Mammana, C. I. Z.	10	T1	E03	172
Machado, F. L. A.	8	M1	09	205	Mammana, C. I. Z.	10	T1	E03	176
Machado, F. L. A.	10	M1	10	90	Mammana, V. P.	9	T1	E03	378
Machado, F. L. A.	10	M2	09	229	Mamontov, I. V.	10	T1	E09	140
Machado, F. L. de A.	8	M1	09	207	Manneville, P.	9	M2	12	114
Machado, K. D.	8	T1	E10	105	Manoel, E. R.	9	T1	E01	74
Machado, L. E.	10	T1	E08	28	Mansanares, A. M.	9	T1	E06	193
Machado, L. E.	10	T1	E08	29	Mansanares, A. M.	8	T1	E02	41
Machado, L. E.	10	T1	E08	29	Mansanares, A. M.	8	T1	E12	215
Machado, L. E.	10	T1	E08	29	Mansanares, A. M.	10	T1	E12	236
Machado, L. E.	10	T1	E08	30	Mansanares, A. M.	10	M1	07	196
Machado, L. E.	10	T1	E08	30	Manzoli, J. E.	8	T1	E13	306
Machado, L. E.	10	T1	E08	31	Manzoli, J. E.	9	T1	E13	327
Machado, L. E.	10	T1	E08	33	Manzur, J.	10	T1	E04	94
Machado, L. E.	10	T1	E08	33	Maple, M. B.	8	M1	09	206
Machado, M. da S.	9	T1	E06	192	Maple, M. B.	8	M2	04	350
Machado, R.	8	M2	09	207	Maple, M. B.	8	M1	04	347
Machado, R. F.	10	T1	E09	143	Maple, M. B.	8	T1	E04	353
Machado, W. V.	10	T1	E13	343	Marcál, N.	9	T1	E03	377
Macial, H. S.	9	T1	E06	191	Marcál, N.	9	T1	E03	380
Maciel, G. S.	8	T1	E07	246	Marcassa, L. G.	9	M1	01	13
Madden, H. H.	8	M1	06	363	Marcassa, L. G.	9	T1	E08	17
Magalhaes-Paniago, R.	10	T1	E12	233	Marcassa, L. G.	10	T1	E07	261
Magalhaes, A. C. N. de	10	T1	E09	139	Marcassa, L. G.	9	T1	E08	17
Magalhaes, A. C. N. de	8	T1	E10	103	Marcassa, L. G.	9	T1	E08	17
Magalhaes, C. Schmidt de	10	T1	E13	339	Marcassa, L. G.	8	T1	E07	245
Magalhaes, M.	10	T1	E03	173	Marcassa, L. G.	9	T1	E08	17
Magon, C. J.	8	T1	E05	149	Marcassa, L. G.	9	T1	E08	18
Magon, C. J.	9	T1	E07	292	Marchetti, D. H. U.	9	M1	12	113
Magon, C. J.	8	M1	09	207	Marchioli, M. A.	10	T1	E09	145
Magon, C. J.	10	T1	E11	282	Marega Jr, E.	10	T1	E13	336
Magon, C. J.	9	M1	04	283	Marega Jr, E.	10	T1	E13	337
Magon, C. J.	9	T1	E07	294	Marega Jr, E.	9	M1	01	13
Ma, H.	8	T1	E07	249	Marega, J. A. M. M.	8	T1	E02	40
Maia, E.	10	M1	03	49	Margaritondo, G.	8	T2	13	386
Main, P.	10	M2	13	335	Margaritondo, G.	9	M1	06	372
Majlis, N.	9	T1	E12	124	Margulis, W.	8	T1	E07	245
Majlis, N.	10	T1	E09	142	Margulis, W.	8	T1	E07	248
Makiuchi, N.	8	M2	01	5	Margulis, W.	10	T1	E07	265
Makiuchi, N.	8	T1	E08	10	Margulis, W.	8	M1	02	240
Makiuchi, N.	8	T1	E08	10	Mariotto, G.	10	T1	E13	345
Makler, S. S.	8	T1	E13	306	Mariotto, G.	10	M1	06	382
Makler, S. S.	8	T1	E13	314	Mariz, A. M.	8	T1	E10	103
Malbouisson, L. A. C.	8	M2	01	5	Mariz, A. M.	10	T1	E10	134
Malbouisson, L. A. C.	8	T1	E08	10	Mariz, A. M.	8	T1	E09	107
Malbouisson, L. A. C.	8	T1	E08	10	Mariz, A. M.	8	T1	E09	109
Maldonado, E. P.	10	T1	E07	264	Mariz, A. M.	9	T1	E12	126
Malmonge, L. F.	10	T1	E11	279	Marques, A. L. F.	9	T1	E13	326
Malvezzi, A. L.	9	T1	E11	120	Marques, C. M.	10	M2	12	130

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Marques, F. das C.	8	T1	E01	63	Mattoso, L. H. C.	9	T1	E02	274
Marques, F. das C.	8	T1	E13	310	Mattoso, L. H. C.	10	M1	11	295
Marques, F. das C.	8	T1	E01	64	Mattoso, L. H. C.	10	T1	E11	279
Marques, F. das C.	8	T1	E13	311	Matuo, C. Y.	10	T1	E03	174
Marques, G. E.	10	T1	E13	338	Matuo, C. Y.	9	M2	10	169
Marques, G. E.	8	M2	13	301	Maude, D. K.	8	M2	13	301
Marquezini, M. V.	10	M2	13	333	Maude, D. K.	8	T1	E13	303
Marquezini, M. V.	10	M1	13	331	Maude, D. K.	8	T1	E13	303
Marshall, P. A.	10	M2	13	334	Maude, D. K.	8	T1	E13	304
Martin Neto, L.	8	T1	E02	40	Maude, D. K.	8	T1	E13	313
Martin, C. A.	9	T1	E07	292	Mauricio, C. L. de P.	8	T1	E01	63
Martinez, E.	8	M1	08	60	Mauricio, M. H. de P.	8	T1	E01	63
Martinez, G.	9	M2	12	115	Mauro, E.	9	T1	E07	286
Martinez, G.	10	T1	E09	144	Mauro, E.	9	T1	E07	286
Martinez, L. E. B.	9	T1	E02	276	Mazzali, C.	10	M2	05	162
Martins, C. S.	10	M1	10	90	Mazzaro, I.	8	M1	10	86
Martins, C. S.	10	M2	09	229	Mazzaro, I.	9	T1	E03	378
Martins, E.	10	M1	08	77	Mazzaro, I.	10	M1	06	383
Martins, E.	8	M1	08	59	Mazzocchi, V. L.	8	M1	09	206
Martins, G. B.	9	T1	E10	359	Mazzoni, M. S. C.	10	T1	E13	341
Martins, G. O.	10	T1	E03	84	Mazzoni, M. S. C.	9	M1	02	318
Martins, J. A.	8	T1	E10	104	Mazzoni, M. S. de C.	9	T1	E13	320
Martins, L. M. M. A.	8	M2	01	5	Mccaffery, A. J.	10	T1	E11	280
Martins, M. D.	8	T1	E02	40	Mcgucken, E.	10	T1	E13	344
Martins, M. J.	9	T1	E11	119	Medeiros Neto, J. A.	10	M2	13	333
Martins, M. L.	10	T1	E02	52	Medeiros Neto, J. A.	8	M1	02	240
Martins, M. L.	10	T1	E02	52	Medeiros Neto, J. A.	8	T1	E13	315
Martins, M. L.	10	T1	E02	56	Medeiros, J. P. de	10	T1	E03	82
Martins, O. G.	10	T1	E03	174	Medeiros, S. M.	8	T1	E13	316
Martins, R. B.	8	M2	02	244	Medeiros, S. M. de	8	M1	09	205
Martins, R. B.	10	T1	E07	262	Medina Neto, A.	9	M2	09	218
Mascarenhas, Y. P.	10	T1	E06	197	Mello, B. de A.	8	M2	05	241
Mascarenhas, Y. P.	10	T1	E06	198	Mello, D. F. de	8	M2	09	208
Mascarenhas, Y. P.	10	T1	E05	93	Mello, E. V. L. de	9	T1	E12	122
Mascarenhas, Y. P.	10	T1	E04	97	Mello, E. V. L. de	8	T1	E10	103
Masoller, C.	10	T1	E07	263	Mello, L. A. de	8	T1	E12	214
Massi, M.	9	T1	E06	191	Mello, M. A. de	10	M2	03	50
Massunaga, M. S. de O.	10	T1	E09	138	Mello, N. C.	9	T1	E07	289
Mastelaro, V. R.	10	T1	E06	198	Mello, S. V.	10	T1	E11	278
Mastro, N. L. D.	8	T1	E02	42	Melo, A. P. de	8	T1	E01	66
Matias, J. G. N.	8	T1	E01	64	Melo, C. A. de S.	8	M1	02	239
Matos, J. do R.	9	T1	E01	75	Melo, C. P. de	9	T1	E02	277
Matos, J. M. O.	8	T1	E08	11	Melo, C. P. de	9	T1	E02	277
Matos, J. M. O.	9	T1	E11	118	Melo, C. P. de	8	M2	11	268
Matos, M.	8	T1	E08	9	Melo, C. P. de	9	M2	11	272
Matsuka, M.	8	T1	E01	63	Melo, E. G.	8	T1	E06	185
Matsuoka, M.	8	T1	E03	370	Melo, F. E. A.	10	T1	E03	82
Mattievich, E.	10	T1	E12	237	Melo, F. E. de A.	10	M1	08	78
Mattievich, E.	10	T1	E12	237	Melo, F. E. de A.	10	M2	08	79
Mattioli, M. P. D.	8	T1	E02	39	Melo, F. E. de A.	10	T1	E03	82
Mattioli, M. P. D.	9	T1	E07	288	Melo, F. E. de A.	10	T1	E03	83
Mattos, C. R. de	8	T1	E09	111	Melo, F. E. de A.	8	M2	08	62
Mattoso Filho, N. P.	9	T1	E03	378	Melo, F. E. de A.	9	T1	E01	75
Mattoso, L. H. C.	10	T1	E11	278	Melo, J. V. de	10	T1	E11	282
Mattoso, L. H. C.	10	T1	E11	278	Melo, L. G. C.	9	T1	E09	223
Mattoso, L. H. C.	10	T1	E11	281	Melo, T. A. de A.	9	M2	07	188

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Melo, T. A. de A.	9	M2	07	189	Mirage, A.	10	T1	E07	260
Mendes Filho, J.	8	M1	09	205	Mirage, A.	10	T1	E07	260
Mendes Filho, J.	10	T1	E03	82	Miranda, J. R. A.	9	M2	03	46
Mendes Filho, J.	9	T1	E06	194	Miranda, L. C. B.	8	T1	E09	109
Mendes Filho, J.	8	M2	07	180	Miranda, M. G. M.	9	T1	E09	224
Mendes Filho, J.	10	M1	08	78	Miranda, P. E. V. de	8	T1	E06	182
Mendes Filho, J.	10	M2	08	79	Miranda, R. M. N.	8	T1	E03	371
Mendes Filho, J.	10	T1	E03	82	Miranda, S. F. de	9	T1	E08	16
Mendes Filho, J.	10	T1	E03	83	Misoguti, L.	10	T1	E13	335
Mendes Filho, J.	8	M2	08	62	Misoguti, L.	9	T1	E03	375
Mendes Filho, J.	8	M1	08	59	Misoguti, L.	9	T1	E03	375
Mendes Filho, J.	9	T1	E01	75	Misoguti, L.	10	T1	E13	345
Mendes Jr, E.	9	T1	E06	195	Misoguti, L.	10	T1	E07	265
Mendes, S. B.	10	T1	E07	263	Missell, F. P.	10	T1	E12	235
Mendes, W. M.	10	T1	E13	340	Missell, F. P.	9	T1	E09	223
Mendes, W. M.	10	T1	E13	345	Missell, F. P.	8	M2	09	207
Mendonca, A. P.	9	T1	E05	158	Missell, F. P.	9	T1	E09	225
Mendonca, A. P.	10	M1	05	160	Missell, F. P.	8	M2	09	208
Mendonca, J. P. R. de	8	T1	E07	248	Missell, F. P.	9	T1	E09	226
Meneses, G. D.	10	T1	E08	31	Mitani, S. E.	9	T1	E03	381
Meneses, G. D.	10	T1	E08	33	Mitros, C.	10	T1	E12	230
Menezes, A. S. C. de	8	M1	09	207	Mittelstadt, F. G.	9	M2	07	189
Menezes, E.	10	T1	E13	342	Miwa, R. H.	9	T1	E13	321
Menezes, E. A.	8	M1	02	240	Miwa, R. H.	9	T1	E13	327
Menezes, E. A.	10	T1	E13	346	Miyao, Y.	9	T1	E03	379
Menezes, L. de S.	10	T1	E07	262	Miyazawa, M.	8	T1	E02	40
Menezes, R. P.	9	T1	E07	286	Mizhahi, S. S.	10	T1	E10	134
Mergulhao, S.	8	T1	E13	308	Mizrahi, S. S.	9	T1	E04	253
Mesquita, J. A.	8	M2	03	38	Mizrahi, S. S.	10	T1	E09	145
Mesquita, O. N. de	9	M2	12	115	Mlayah, A.	9	T1	E13	322
Mesquita, O. N. de	9	M1	08	68	Moares, F.	9	T1	E10	358
Messaddeq, Y.	8	T1	E07	246	Moehlecke, S.	8	M1	04	348
Messaddeq, Y.	10	M2	02	259	Moehlecke, S.	9	T1	E10	355
Messadeq, Y.	10	T1	E06	198	Moehlecke, S.	9	T1	E10	356
Messias, L. G. de O.	10	T1	E13	338	Moehlecke, S.	10	M2	04	362
Messina, A. M.	10	T1	E07	260	Mohajeri-Moghaddam, H.	8	T1	E07	246
Mestnik Filho, J.	9	T1	E09	222	Mohallem, J. R.	8	T1	E08	7
Metcalf, H.	9	M2	01	14	Mohallem, J. R.	8	T1	E08	11
Metcalf, H.	9	T1	E08	21	Mohallem, J. R.	8	M2	01	6
Meyer, E.	10	T1	E06	198	Mohallem, N. D. S.	10	T1	E12	233
Mibu, K.	10	T1	E12	237	Mohallem, N. D. S.	10	T1	E06	204
Michelin, S. E.	10	T1	E08	28	Mombro, A. W.	10	T1	E12	230
Michelin, S. E.	10	T1	E08	29	Mondragon, J. C.	8	T1	E04	352
Michelin, S. E.	10	T1	E08	31	Monken, C. H.	9	T1	E04	254
Michelin, S. E.	10	T1	E08	33	Montagna, M.	9	T1	E13	323
Michelin, S. E.	10	T1	E08	33	Montanher, V. C.	10	T1	E13	344
Michelin, S. E.	10	T1	E08	33	Monte, A. F. G. do	8	T1	E07	249
Milman, F. S.	10	T1	E10	138	Monteiro, C.	10	M2	02	259
Milman, P.	8	T1	E02	43	Monteiro, E. C.	10	M2	05	163
Milori, D. M. B. P.	9	M2	04	285	Monteiro, W. A.	9	M2	07	189
Milori, D. M. B. P.	9	M2	01	14	Montenegro, F. C.	8	M1	09	205
Milori, D. M. B. P.	9	T1	E08	18	Montenegro, F. C.	10	T1	E09	144
Milori, D. M. B. P.	9	T1	E08	19	Montes, C. B. P.	9	T1	E01	72
Minhaco, G. A.	10	T1	E02	55	Monzani, A. L.	10	T1	E08	29
Miola, E. J.	9	T1	E09	225	Monzani, A. L.	10	T1	E08	30
Miotto, R.	9	T1	E13	321	Moraes, F.	8	T1	E09	109

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Moraes, F.	9	T1	E12	125	Moreira, M. V. B.	8	T1	E13	316
Moraes, F.	9	T1	E13	329	Moreira, M. V. C. B.	8	T1	E13	305
Moraes, F.	9	T1	E13	330	Moreira, R. L.	10	M2	08	79
Moraes, I. J.	9	M2	04	285	Moreira, R. L.	9	M1	11	270
Moraes, J. C. S.	9	T1	E08	21	Moreira, S. G. C.	10	M2	08	79
Moraes, J. C. S.	9	M2	01	15	Moreira, S. G. C.	10	T1	E03	82
Moraes, J. N. B. de	9	T1	E11	117	Moreira, S. G. C.	10	T1	E03	83
Moraes, M. A. B. de	9	T1	E03	377	Moreira, S. G. C.	8	M2	08	62
Moraes, M. A. B. de	9	M2	08	71	Morelha, S. L.	9	T1	E01	72
Moraes, M. A. B. de	9	T1	E03	380	Morelha, S. L.	9	T1	E01	73
Morais, J.	9	T1	E01	72	Morelha, S. L.	9	M2	08	70
Morais, P. C.	10	T1	E03	170	Morel, R.	10	M2	09	229
Morais, P. C.	10	T1	E03	170	Moreno-Gobbi, A. O.	9	T1	E06	191
Morais, P. C. de	10	T1	E13	335	Moreno, A. J. de D.	10	T1	E03	82
Mora, N. D.	10	T1	E06	199	Moreno, N. O.	8	M1	09	205
Morato, S. P.	10	T1	E07	264	Morgado, W. A. M.	10	T1	E09	143
Morato, S. P.	10	T1	E03	83	Morgoon, V. N.	9	T1	E10	357
Morato, S. P.	8	M1	08	60	Moriconi, L.	8	T1	E13	307
Morato, S. P.	10	T1	E03	83	Morikawa, E.	8	T1	E05	148
Morato, S. P.	8	T1	E01	65	Mors, P. M.	10	T1	E12	230
Morato, S. P.	9	T1	E01	74	Mors, P. M.	8	T1	E06	183
Morato, S. P.	9	T1	E01	75	Moruzzi, G.	9	M2	01	15
Morato, S. P.	10	T1	E07	264	Mosca Jr, D. H.	10	M1	06	383
Morato, S. P.	10	M1	08	77	Mosca, D. H.	9	T1	E03	378
Morato, S. P.	8	M1	08	59	Moscati, G.	9	T1	E03	379
Morato, S. P.	9	M2	03	47	Mota, F. de B.	10	T1	E13	336
Morato, S. P.	9	T1	E05	158	Mota, F. de B.	10	T1	E13	336
Moreira Junior, O.	9	T1	E05	156	Mota, F. de B.	9	T1	E13	328
Moreira Sobrinho, A. C.	8	M2	01	5	Mota, R.	8	M2	04	350
Moreira Sobrinho, A. C.	8	T1	E08	10	Mota, R. P.	9	M2	08	71
Moreira Sobrinho, A. C.	8	T1	E08	10	Mota, R. P.	8	M1	11	268
Moreira, A. F. da S.	9	T1	E12	125	Moura Filho, J. J. D.	10	M2	06	384
Moreira, E. N.	10	T1	E03	81	Moura Filho, J. J. de	8	T1	E03	371
Moreira, F. A. M.	8	T1	E04	350	Moura, C. S.	10	M1	09	228
Moreira, F. G. B.	8	T1	E09	109	Moura, J. A. de S.	10	M1	09	228
Moreira, F. G. B.	10	T1	E10	136	Moura, J. A. S.	10	M1	09	228
Moreira, F. G. B.	8	T1	E10	103	Moura, J. A. S.	10	M2	09	229
Moreira, F. M. A.	9	T1	E10	354	Moura, J. I. de	9	T1	E09	222
Moreira, H. S.	8	T1	E13	313	Moura, M. A. de	8	T1	E07	247
Moreira, J. A. M.	8	T1	E06	181	Moussa, M. H. Y.	9	T1	E04	253
Moreira, J. E. de C.	10	T1	E03	82	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	28
Moreira, J. E. de C.	10	M1	08	78	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	29
Moreira, J. E. de C.	10	M2	08	79	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	29
Moreira, J. E. de C.	10	T1	E03	82	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	29
Moreira, J. E. de C.	10	T1	E03	83	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	30
Moreira, J. E. de C.	8	M2	08	62	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	30
Moreira, J. E. de C.	9	T1	E01	75	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	31
Moreira, J. G.	10	M1	12	129	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	33
Moreira, J. G.	8	M1	12	98	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	33
Moreira, J. G.	10	T1	E09	143	Mu-Tao, L.	10	T1	E08	33
Moreira, L. F.	10	T1	E12	237	Mu-Tao, L.	10	M1	01	22
Moreira, L. F.	10	T1	E12	237	Mucciolo, E. R.	9	M1	02	318
Moreira, M.	9	T1	E05	157	Mulato, M.	9	T1	E01	71
Moreira, M. V.	10	T1	E13	341	Muller, I. L.	8	T1	E06	184
Moreira, M. V. B.	8	T1	E13	306	Mundim, K. C.	9	M1	10	167
Moreira, M. V. B.	8	T1	E13	312	Mundim, K. C.	10	M2	03	51

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Mundim, M. S. P.	10	T1	E08	34	Nero, J. D.	10	T1	E12	238
Munin, E.	8	M2	02	243	Nero, J. D.	10	T1	E12	238
Muniz, R. B.	10	T1	E12	233	Nero, J. D.	10	T1	E12	238
Muniz, R. B.	10	T1	E12	234	Nery, S. M. D.	8	M1	11	268
Muniz, S.	9	T1	E08	17	Netto, T. G.	10	M1	05	162
Muniz, S. C.	9	T1	E08	17	Neumann, A.	8	M2	12	100
Muniz, S. R.	8	T1	E07	245	Neves, B. R. A.	8	T1	E13	312
Munoz, W. O.	9	T1	E13	320	Neves, J. M.	10	M2	13	335
Munte, C. E.	8	T1	E02	39	Neves, M. A.	10	T1	E06	199
Muramatsu, M.	9	T1	E04	253	Neves, U. P. da C.	8	T1	E10	101
Muramatsu, M.	8	T1	E05	150	Niarchos, D.	10	T1	E12	230
Muramatsu, M.	9	T1	E04	256	Nicacio, D. L.	8	T1	E07	247
Murta Jr., L. O.	9	T1	E05	157	Nickel, P.	9	T1	E07	293
Nagamine, L. C. C. M.	9	T1	E09	221	Nicola, E. M. D.	9	M2	03	47
Nagashima, H. N.	9	T1	E02	273	Nicola, J. H.	9	M2	03	47
Nagashima, H. N.	9	T1	E02	273	Nicolo, I. de	8	T1	E06	183
Nagashima, H. N.	9	T1	E02	273	Nishiyama, S.	8	T1	E03	370
Nakagaito, A. N.	10	T1	E13	335	Nobre, F. D.	10	T1	E10	134
Nakagaito, A. N.	9	T1	E03	375	Nobre, F. D.	8	T1	E09	107
Nakagaito, A. N.	9	T1	E03	375	Nobre, F. D.	8	T1	E09	108
Nakagaito, A. N.	10	T1	E13	345	Nobre, F. D.	10	T1	E09	144
Nakamura, O.	9	T1	E06	190	Nogueira Jr, E.	10	T1	E09	144
Nascente, P. A. de P.	8	M1	06	364	Nogueira, F. de S.	10	T1	E02	54
Nascente, P. A. de P.	10	M2	07	197	Nogueira, F. de S.	10	M2	03	51
Nascimento, A. F. do	9	T1	E09	224	Nogueira, F. de S.	8	M2	04	349
Nascimento, G. C. do	10	M2	11	297	Nogueira, G. E. C.	9	T1	E05	158
Nascimento, H. A. D. do	9	M2	12	115	Nogueira, J. C.	10	T1	E08	26
Nascimento, M. L. F.	8	T1	E01	63	Nogueira, J. de S.	10	T1	E11	281
Nascimento, O. R.	8	M2	03	37	Nogueira, J. de S.	10	T1	E11	279
Nascimento, O. R.	8	T1	E02	39	Nogueira, R. N.	10	T1	E12	231
Nascimento, O. R.	9	T1	E07	288	Nogueira, S. R.	8	T1	E08	7
Nascimento, O. R.	8	T1	E02	40	Nommiste, E.	9	M2	01	15
Nascimento, O. R.	8	M2	03	37	Nommiste, E.	9	T1	E08	21
Nascimento, O. R.	9	M2	04	285	Novais, A. R.	10	T1	E08	30
Nascimento, O. R.	9	T1	E02	275	Novak, M. A.	8	M2	09	208
Nascimento, O. R. do	8	T1	E02	40	Novak, M. A.	8	T1	E05	152
Nastaushev, Y. V.	8	T1	E13	303	Nowak, U.	8	M1	09	205
Nastaushev, Y. V.	8	T1	E13	303	Nunes, F. D.	10	T1	E03	82
Nastaushev, Y. V.	8	T1	E13	304	Nunes, F. D.	9	T1	E06	194
Nastaushev, Y. V.	10	M2	13	334	Nunes, F. D.	8	M2	07	180
Nastaushev, Y. V.	8	T1	E13	313	Nunes, F. D.	8	M1	02	239
Nastaushev, Y. V.	8	T1	E13	316	Nunes, F. D.	10	M1	08	78
Navarro, M. da S.	8	T1	E01	66	Nunes, F. D.	10	M2	08	79
Nazareno, H. N.	8	T1	E13	303	Nunes, F. D.	10	T1	E03	82
Nazareno, H. N.	8	T1	E12	215	Nunes, F. D.	10	T1	E03	83
Nazareno, H. N.	8	T1	E04	353	Nunes, F. D.	8	M2	08	62
Nechiporenko, I. N.	9	T1	E10	357	Nunes, F. D.	8	M1	08	59
Negreira, C. A.	10	T1	E06	200	Nunes, F. D.	9	T1	E01	75
Negus, D. K.	8	M2	02	242	Nunes, L. A. O.	8	T1	E07	246
Neirotti, J. P.	9	T1	E11	119	Nunes, O. A. C.	10	T1	E07	264
Neiva, A.	9	T1	E09	224	Nunes, R. A.	8	T1	E01	63
Neiva, A. C.	8	M1	07	177	Nunes, R. A.	10	M1	08	78
Nemes, M. C.	9	T1	E11	120	Ocampo, J. M. J.	9	T1	E04	255
Nemes, M. C.	9	T1	E11	117	Ogata, K.	8	T1	E03	370
Neri, J. W.	10	T1	E07	260	Oiwa, N. N.	10	T1	E10	131
Neri, J. W.	10	T1	E07	260	Oki, N.	9	T1	E02	273

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Okuno, E.	8	T1	E01	67	Oliveira, L. C. de	10	M2	02	258
Okuno, E.	8	T1	E01	67	Oliveira, L. de	9	T1	E13	325
Oliva, G.	10	T1	E04	97	Oliveira, L. E.	9	T1	E13	323
Oliva, G.	10	M1	03	49	Oliveira, L. E.	8	T1	E13	308
Oliveira Filho, J. E. C. de	8	T1	E12	210	Oliveira, L. E.	9	T1	E13	326
Oliveira Jr, N. F.	8	T1	E13	314	Oliveira, L. E. M.	8	M2	13	301
Oliveira Jr, N. R. de	9	M2	07	189	Oliveira, L. J. P. de	9	M2	12	115
Oliveira Jr, O. N.	8	M1	11	267	Oliveira, L. M. de	9	T1	E07	287
Oliveira Jr, O. N.	9	M1	11	271	Oliveira, L. N.	9	M1	09	218
Oliveira Jr, O. N.	10	T1	E11	280	Oliveira, L. N. de	8	T1	E12	211
Oliveira Jr, O. N. de	10	T1	E11	278	Oliveira, L. N. de	8	T1	E12	212
Oliveira Jr, O. N. de	10	T1	E11	278	Oliveira, L. N. de	8	T1	E03	368
Oliveira Jr, O. N. de	10	T1	E11	278	Oliveira, M. A. S.	10	M2	08	79
Oliveira Junior, N. R. de	8	M1	07	178	Oliveira, M. J. de	9	M1	12	113
Oliveira Junior, Z. T. de	10	T1	E08	31	Oliveira, M. J. de	9	T1	E11	117
Oliveira Neto, J. E. de	9	T1	E06	194	Oliveira, M. J. de	10	T1	E10	135
Oliveira, A. C. de	9	T1	E09	221	Oliveira, M. J. de	9	T1	E11	119
Oliveira, A. C. de	10	T1	E06	201	Oliveira, M. J. de	9	T1	E11	119
Oliveira, A. C. de	10	T1	E06	201	Oliveira, P. C. de	8	M2	02	242
Oliveira, A. C. de	9	T1	E06	193	Oliveira, P. M. C. de	9	T1	E12	122
Oliveira, A. G.	10	T1	E13	346	Oliveira, P. M. C. de	8	T1	E10	102
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	305	Oliveira, P. M. C. de	10	M1	12	128
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	306	Oliveira, P. M. C. de	10	T1	E10	135
Oliveira, A. G. de	9	T1	E13	322	Oliveira, P. M. C. de	8	M1	12	99
Oliveira, A. G. de	10	T1	E13	339	Oliveira, R. B.	9	M2	03	46
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	309	Oliveira, R. G.	10	T1	E13	340
Oliveira, A. G. de	9	T1	E13	326	Oliveira, S. M. de	9	T1	E12	122
Oliveira, A. G. de	10	T1	E13	341	Oliveira, S. M. de	8	T1	E10	102
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	312	Oliveira, S. M. de	10	M1	12	128
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	313	Oliveira, W. C.	9	M1	09	218
Oliveira, A. G. de	9	M1	02	318	Oliveira, W. da C. de	8	T1	E12	212
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	316	Oliveira, W. J. C. de	8	M2	02	244
Oliveira, A. G. de	9	T1	E13	330	Olzon-Dionysio, M.	8	M1	09	207
Oliveira, A. G. de	8	T1	E13	316	Olzon-Dionysio, M.	8	M2	08	61
Oliveira, A. J. A. de	10	T1	E12	231	Onate, M. R. T.	10	T1	E03	175
Oliveira, A. L. de	8	M2	11	269	Onmori, R. K.	9	T1	E02	274
Oliveira, C. E. M. de	9	T1	E01	76	Onody, R. N.	8	T1	E10	101
Oliveira, C. R. M. de	10	M2	13	333	Oria, M. C. S.	9	M2	01	14
Oliveira, C. R. M. de	10	T1	E13	338	Oria, M. C. S.	9	M2	02	251
Oliveira, C. R. M. de	8	M1	02	240	Ornellas, F. R.	8	T1	E08	12
Oliveira, C. R. M. de	8	T1	E13	315	Ortega, N. R. S.	10	T1	E06	201
Oliveira, E. A. de	10	T1	E03	173	Ortega, P. L. J.	8	M2	13	301
Oliveira, E. A. de	9	M1	10	168	Ortiz, J. F. S.	10	T1	E10	132
Oliveira, E. N. de	9	T1	E07	287	Ortiz, J. F. S.	10	T1	E10	133
Oliveira, F.	8	M2	11	269	Ortiz, J. F. S.	10	T1	E09	140
Oliveira, F. A. M. de	9	M2	02	251	Ortiz, W. A.	8	T1	E04	350
Oliveira, F. A. M. de	10	M1	02	257	Ortiz, W. A.	9	T1	E10	354
Oliveira, F. A. M. de	9	M2	02	251	Ortiz, W. A.	9	T1	E09	222
Oliveira, F. A. M. de	10	T1	E07	265	Ortiz, W. A.	10	T1	E12	231
Oliveira, I. G. de	8	M2	04	349	Osborne, S.	9	T1	E08	20
Oliveira, J. B. de	10	T1	E13	346	Osborne, S. J.	9	M2	01	15
Oliveira, J. C. P. de	8	M1	09	205	Osborne, S. J.	9	T1	E08	21
Oliveira, J. de	9	T1	E09	220	Osenda, O.	10	T1	E10	131
Oliveira, J. E. B.	10	M2	05	163	Ott, H. R.	9	T2	02	387
Oliveira, J. E. B.	10	M2	02	259	Ouriques, G. R.	10	T1	E03	175
Oliveira, L.	8	M1	08	59	Ouriques, G. R.	10	T1	E03	175

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Ouriques, G. R.	10	T1	E02	57	Pascual, M. F.	10	T1	E10	132
Pacheco, J. G.	8	T1	E05	148	Pascual, M. F.	10	T1	E10	132
Pacheco, J. G.	8	T1	E05	148	Pascual, M. F.	10	T1	E09	140
Pacheco, J. S.	9	M1	05	153	Pascutti, P. G.	10	M2	03	50
Pacheco, M. T. T.	9	M2	05	154	Pascutti, P. G.	10	M2	03	51
Pacheco, M. T. T.	9	M2	05	155	Passamani, E. C.	9	T1	E03	379
Pacobahyba, L. H.	10	M2	11	297	Passamani, E. C.	9	T1	E03	380
Padua, A. de	8	T1	E09	109	Passamani, E. C.	10	T1	E12	237
Paduaag, S.	9	M2	01	14	Passeggi, M. C. G.	8	M2	03	38
Paduaag, S.	9	T1	E08	21	Passos, A. C.	10	T1	E06	204
Paduan Filho, A.	9	M1	12	113	Passy, R.	8	M2	02	244
Paduani, C.	9	T1	E09	220	Passy, R.	8	M1	02	240
Paduani, C.	9	T1	E09	220	Pastawski, H. M.	9	T1	E07	293
Paduani, C.	8	T1	E12	210	Pastawski, H. M.	8	T1	E13	314
Paduani, C.	9	M2	07	189	Patel, N. B.	8	M2	02	244
Padua, S.	9	T1	E04	254	Patnaik, B. K.	10	T1	E13	344
Padua, S. de	9	T1	E04	254	Paula, A. M. de	10	M2	13	333
Padua, S. de	10	M1	02	257	Paula, A. M. de	10	M1	13	332
Paesano Jr, A.	9	M2	06	373	Paula, A. M. de	10	T1	E13	338
Pagnano, C. A. G.	9	T1	E01	73	Paula, A. M. de	8	M1	02	240
Pagnano, M. A. de O.	8	T1	E05	149	Paula, C. A. de	9	M2	06	374
Paiva, J. A. C. de	8	M2	08	61	Paula, E.	9	T1	E05	157
Paiva, J. A. C. de	10	M2	08	78	Paula, G. L. de S.	10	T1	E10	133
Paiva, J. A. C. de	10	M2	08	80	Paullin Filho, P. I.	10	T1	E06	198
Paiva, T.	8	T1	E12	216	Pavao, A. C.	8	T1	E04	352
Paixao, F. J.	10	M2	01	24	Pavao, A. C.	8	M1	04	348
Paixao, F. J. da	10	T1	E08	28	Pavao, A. C.	8	T1	E04	353
Pakter, R.	10	T1	E07	263	Pawlicka, A.	10	T1	E11	280
Palacio, F.	9	M1	12	113	Pawlicka, A.	9	M2	04	285
Palacios, H. T.	10	T1	E05	91	Pawlicka, A.	9	T1	E02	275
Palangana, A. J.	9	M1	10	167	Pazzetti, A. C. B.	10	T1	E03	172
Palangana, A. J.	10	T1	E03	172	Pchelyakov, O.	10	T1	E13	341
Palangana, A. J.	10	T1	E03	172	Pedrini, C.	8	M1	08	60
Pallas, M. T. C.	9	T1	E07	292	Pedro, C. R.	10	T1	E07	264
Pandolfelli, V. C.	9	M1	07	186	Pedrosa, M. I. P. de C.	8	T1	E09	110
Panepucci, H.	10	M1	11	296	Pedroza, A. C.	8	M2	01	6
Panepucci, H.	10	M1	11	295	Peduto, P. R.	8	T1	E03	369
Panepucci, H.	10	M1	11	295	Peeters, F. M.	8	M2	13	302
Panepucci, H.	10	M1	11	295	Peiro, G. P.	10	T1	E03	83
Panepucci, H.	9	T1	E07	289	Pela, C. A.	10	M1	05	162
Panepucci, H.	10	M1	11	296	Pelegri, F.	10	T1	E03	170
Panepucci, H.	10	M1	11	296	Pelegri, F.	10	T1	E03	170
Panepucci, H. C.	10	M1	11	294	Pelegri, F.	9	T1	E07	290
Papa, A. R. R.	8	T1	E09	107	Pelzl, J.	10	T2	12	390
Papaleo, R. M.	10	T1	E11	279	Pelzl, J.	10	M1	07	195
Paradisi, A.	10	T1	E07	262	Pena, A. F. V.	10	T1	E06	199
Parente, C. B. R.	8	M1	09	206	Pena, A. F. V.	9	T1	E03	379
Parikh, N. R.	10	T1	E13	344	Pena, A. F. V.	10	M1	06	382
Pariona, M. M.	8	T1	E06	184	Penna, T. J. P.	10	M2	12	130
Parra, R.	9	T1	E02	274	Penna, T. J. P.	10	T1	E10	135
Parreira, J. R.	9	T1	E11	116	Perdigao, M. N. R. V.	8	M1	07	178
Parreira, J. R.	9	T1	E11	116	Pereira Filho, M. de S.	8	T1	E06	181
Partiti, C. S. M.	9	T1	E09	221	Pereira Neto, J. R.	10	T1	E11	281
Partiti, C. S. M.	9	T1	E09	222	Pereira, A.	10	M2	04	361
Pasa, A. A.	8	M2	06	365	Pereira, A. C.	8	T1	E02	41
Pascual, M. F.	10	M1	12	128	Pereira, A. C.	9	T1	E08	22

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Pereira, A. O.	9	T1	E02	274	Pinatti, D. G.	9	T1	E10	358
Pereira, A. R.	10	T1	E03	170	Pinatti, D. P. F. S.	10	T1	E06	198
Pereira, C.	9	M2	01	15	Pinchaux, R.	10	T1	E13	341
Pereira, C. A.	8	T1	E10	105	Pinero, M.	9	M1	07	187
Pereira, C. C.	10	T1	E03	172	Pinheiro, C. B.	10	T1	E05	92
Pereira, C. C.	10	T1	E03	175	Pinho, R. R.	8	T1	E03	371
Pereira, D.	10	M2	01	24	Pinho, R. R.	10	M2	06	384
Pereira, D.	10	T1	E08	27	Pinho, R. R.	8	M2	03	38
Pereira, D.	8	M2	02	241	Pino Jr, A. D.	8	M2	06	365
Pereira, D.	9	T1	E08	21	Pino Junior, A. D.	9	T1	E13	329
Pereira, D.	9	M2	01	15	Pino Junior, A. D.	8	T1	E08	11
Pereira, E. C.	9	M2	04	285	Pinotti, J. A. P.	9	M1	05	153
Pereira, E. C.	9	T1	E02	275	Pintao, C. A. F.	9	T1	E06	195
Pereira, F. S.	10	T1	E07	260	Pinto, A. V. A.	10	T1	E03	171
Pereira, J. A. A. M.	10	T1	E12	235	Pinto, A. V. A.	10	T1	E03	171
Pereira, J. A. M.	8	T1	E03	368	Pinto, A. V. A.	10	T1	E03	171
Pereira, J. A. M.	8	T1	E03	368	Pinto, A. V. de A.	10	T1	E03	176
Pereira, J. A. M.	10	T1	E08	31	Pinto, C. D. A.	10	T1	E02	53
Pereira, L. G.	10	M2	09	229	Pinto, R. D.	10	T1	E10	135
Pereira, R. A. R.	10	T1	E03	174	Pinto, R. D.	10	T1	E10	135
Pereira, R. B.	8	T1	E08	10	Piquini, P.	10	M2	03	50
Pereira, R. F. R.	10	T1	E06	199	Piquini, P.	8	T1	E08	7
Pereira, S. L.	9	T1	E09	226	Piquini, P.	8	M2	06	365
Pereta, M. A.	9	T1	E05	159	Piquini, P.	10	T1	E13	336
Perez-Merchancano, S. T.	8	T1	E13	308	Pires, A. N.	9	M2	07	189
Perez, C. A. S.	8	T1	E12	214	Pires, A. S. T.	10	M2	04	361
Perez, C. A. S.	9	T1	E09	223	Pires, A. S. T.	8	T1	E12	216
Perez, J. F.	9	T1	E11	116	Pires, M. A.	9	T1	E07	287
Perez, J. F.	9	T1	E11	116	Pires, M. A.	9	T1	E10	359
Perez, J. L.	10	T1	E07	263	Pissas, M.	10	T1	E12	230
Persechini, P. M.	8	M1	03	36	Pitanga, P.	9	M1	10	167
Persiano, A. I.	9	T1	E09	222	Pizani, P. S.	9	T1	E13	322
Persiano, A. I. C.	10	T1	E12	232	Pizani, P. S.	10	M2	08	79
Perussi, J. R.	10	M1	11	297	Plascak, J. A.	9	T1	E12	121
Pesek, A.	9	M2	08	69	Plascak, J. A.	9	T1	E12	121
Pessoa, E. F.	9	T1	E07	290	Plascak, J. A.	9	T1	E11	118
Petiau, J.	10	T1	E13	344	Plentz Filho, F. O.	8	M1	02	240
Petri, A.	9	M1	12	113	Policastro, A. P.	10	M2	01	24
Petrilli, H. M.	10	T1	E12	231	Policastro, A. P.	8	T1	E08	7
Petrov, D.	10	M2	02	258	Politano, R.	8	M2	09	208
Peyghambarian, N.	8	T1	E07	246	Politano, R.	9	T1	E09	226
Pfannes, H.	10	T1	E12	233	Ponciano, C. R.	8	M2	03	38
Pfannes, H. -D.	10	T1	E12	233	Pons, C.	10	T1	E06	201
Pfannes, H. -D.	8	T1	E02	40	Pontes, M. J.	8	M1	02	239
Pfannes, H. -D.	9	T1	E09	226	Ponti, S.	9	M2	10	169
Pfannes, H. -D.	9	T1	E09	226	Popov, V. P.	9	T1	E10	357
Picoli, R. A.	8	T1	E05	148	Porciuncula, P.	10	M2	05	164
Pierre, J.	10	M1	09	227	Portal, J. C.	8	M2	13	301
Pilla, O.	9	T1	E06	190	Portal, J. C.	8	T1	E13	303
Pilla, O.	9	T1	E13	323	Portal, J. C.	8	T1	E13	303
Pilla, O.	8	M1	08	59	Portal, J. C.	8	T1	E13	304
Pimenta, M. A.	10	M1	12	128	Portal, J. C.	8	T1	E13	313
Pimenta, M. A.	10	M2	08	79	Portela, C. F.	8	T1	E09	109
Pimenta, M. A.	10	T1	E05	93	Posadas, A. D.	10	M1	11	296
Pimenta, M. A.	10	M1	10	89	Poulain, M.	10	M1	08	76
Pimenta, M. A. C.	10	T1	E03	80	Pourrahimi, S.	9	T1	E10	357

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Povoa, J. M.	8	M2	08	61	Ramos, A. Y.	10	T1	E13	344
Prado, F. M.	8	T1	E13	315	Ramos, A. Y.	10	T1	E06	201
Prado, L.	8	T1	E01	65	Ramos, C.	9	T1	E07	287
Prassides, K.	10	T1	E12	230	Ramos, L. R.	10	T1	E13	335
Prataviera, G. A.	10	T1	E10	134	Ramos, L. R.	9	T1	E03	375
Prazeres, G. M. P.	8	T1	E09	110	Ramos, L. R.	9	T1	E03	375
Preobrashenskii, V. V.	10	T1	E13	337	Ramos, L. R.	10	T1	E13	345
Preobrazhenskii, V.	10	T1	E13	341	Rangel, E. C.	9	T1	E03	377
Prevost, M.	10	M1	03	48	Rangel, E. C.	9	T1	E03	380
Procopio, J.	10	T1	E02	57	Ranieri, I. M.	10	T1	E03	83
Proetto, C.	8	M2	13	302	Ranieri, I. M.	10	T1	E07	264
Prola Junior, C. H.	10	T1	E07	263	Ranieri, I. M.	10	T1	E07	264
Pudensi, M.	10	T1	E13	342	Ranieri, I. M.	9	T1	E05	158
Pudensi, M. A. A.	8	T1	E13	305	Raposo, E. C. P.	10	T1	E09	144
Pulcinelli, S. H.	9	M1	07	188	Raposo, E. C. P.	9	M2	09	219
Pureur, P.	9	T1	E10	359	Rechenberg, H. R.	9	T1	E09	221
Pureur, P.	10	M1	04	360	Rechenberg, H. R.	9	T1	E09	221
Pureur, P.	10	M2	04	361	Rechenberg, H. R.	9	T1	E09	222
Pusiol, D. J.	10	M2	11	298	Rechenberg, H. R.	9	M2	07	189
Pusiol, D. J.	10	M2	11	298	Rechenberg, H. R.	8	M1	01	166
Pusiol, D. J.	9	T1	E07	292	Redinz, J. A.	10	T1	E09	139
Pusiol, D. J.	9	T1	E07	293	Redon, O.	10	M1	09	227
Pusiol, D. J.	10	T1	E03	171	Reiche, R.	8	T1	E07	246
Pusiol, D. J.	9	M2	10	168	Reigada, D. C.	8	T1	E07	248
Py, M. A.	8	T1	E13	316	Reinehr, E. E.	8	T1	E10	102
Quadros, S. G. de A.	9	T1	E12	122	Reis, A. M.	8	T1	E07	245
Queiroz, E. V.	9	T1	E08	17	Reis, F. D. A. A.	10	T1	E09	141
Queiroz, E. V.	10	T1	E07	261	Reis, L. M. dos	9	T1	E03	377
Queiroz, E. V.	9	T1	E08	17	Resende, X. R.	9	T1	E13	325
Queiroz, J. R. de O.	8	T1	E06	181	Rettori, C.	9	T1	E10	359
Quintale Junior, C.	10	T1	E09	145	Rezende, S. M.	10	M1	09	228
Quintale Junior, C.	10	T1	E09	145	Rezende, S. M.	10	M2	09	229
Quintao, A. D.	8	T1	E08	11	Rezende, S. M.	10	M2	09	229
Quintella, C. M.	10	T1	E11	280	Rezende, S. M.	10	M1	09	228
Quivy, A. A.	10	T1	E13	344	Ribas, P. R. F.	10	T1	E13	345
Quivy, A. A.	9	M2	08	70	Ribeiro Filho, A.	9	M1	10	167
Quivy, A. A.	9	T1	E01	75	Ribeiro Filho, A.	10	T1	E09	144
R. Filho, J.	10	T1	E07	262	Ribeiro Filho, A.	9	T1	E11	118
R. Junior, J. J.	9	T1	E01	75	Ribeiro Filho, J.	10	T1	E13	343
Rabbani, S. R.	9	M2	08	70	Ribeiro-Teixeira, R. M.	9	M2	09	219
Rabbani, S. R.	10	M2	11	298	Ribeiro, A. L.	10	T1	E07	260
Rabello, L. M.	9	T1	E05	157	Ribeiro, C. A.	10	T1	E12	230
Rabelo, A.	8	T1	E03	369	Ribeiro, C. A.	10	T1	E12	233
Rabelo, J. N. T.	10	T1	E09	139	Ribeiro, C. A.	9	T1	E09	223
Rabelo, J. N. T.	10	T1	E09	140	Ribeiro, C. A.	8	M1	07	177
Rabelo, J. N. T.	10	M1	12	128	Ribeiro, E.	10	T1	E13	338
Raikher, Y.	8	M1	01	165	Ribeiro, E. M. S.	10	T1	E08	30
Raikher, Y.	9	M1	10	166	Ribeiro, F. de J.	8	T1	E13	307
Rakennus, K.	9	T1	E01	73	Ribeiro, G. M.	9	T1	E13	322
Ramaswamy, M.	8	M2	02	242	Ribeiro, G. M.	10	T1	E13	339
Ramirez-Del-Solar, M.	9	M1	07	187	Ribeiro, G. M.	9	T1	E13	326
Ramos, A. S.	8	M1	04	348	Ribeiro, G. M.	9	M1	02	318
Ramos, A. Y.	10	T1	E04	96	Ribeiro, G. M.	9	T1	E13	330
Ramos, A. Y.	10	T1	E04	96	Ribeiro, J. de F.	10	T1	E06	199
Ramos, A. Y.	9	M1	07	187	Ribeiro, P. H. S.	9	T1	E04	254
Ramos, A. Y.	9	M2	07	188	Ribeiro, P. H. S.	9	T1	E04	254

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Ribeiro, P. H. S.	10	M1	02	257	Rodrigues, P. J. C.	10	M2	05	163
Ribeiro, P. H. S.	9	T1	E04	254	Rodrigues, P. J. C.	10	M2	02	259
Ribeiro, R. M.	10	T1	E07	265	Rodrigues, R. G. de S.	10	M1	05	162
Ribeiro, S.	10	T1	E06	198	Rodrigues, S. C. P.	9	T1	E13	324
Ricci, T. F.	10	T1	E10	137	Rodrigues, S. G.	9	T1	E06	192
Richa Junior, G.	8	T1	E05	150	Rodrigues, S. G.	8	T1	E12	216
Riera, R.	10	T1	E09	141	Rodrigues, W. N.	10	T1	E13	341
Riera, R.	8	T1	E09	109	Rodriguez, C. R.	10	M2	11	298
Riesz, F.	9	T1	E01	73	Rodriguez, V. P.	9	T1	E03	379
Righi, A.	10	M2	08	79	Rojas, J. R.	8	T1	E04	353
Righi, A.	9	M1	11	270	Rolim, A. L. V. S.	9	T1	E03	380
Righi, A.	10	T1	E03	80	Rolim, A. L. V. S.	8	T1	E04	353
Rijo, P. A.	9	T1	E09	226	Roman, L. S.	8	T1	E08	8
Rincon, L.	8	M2	01	5	Romano, J. A.	9	T1	E06	193
Rino, J. P.	10	T1	E09	139	Romano, J. A.	8	T1	E02	41
Rino, J. P.	10	T1	E09	142	Romano, J. A.	8	T1	E12	215
Riofano, P. H. R.	8	T1	E13	308	Romano, J. A.	10	T1	E12	236
Rios, J. M. M.	8	M1	02	240	Rosa Junior, E.	8	M2	11	269
Riske, K. do A.	8	T1	E02	42	Rosa-Fox, N. de L.	9	M1	07	187
Riul Jr, A.	10	T1	E11	278	Rosa, A. L.	10	T1	E09	140
Riva, R.	10	T1	E07	260	Rosas, A.	10	T1	E10	137
Rizzo, P.	10	M1	05	161	Rosas, F.	10	M2	08	80
Robbins, M. O.	10	M2	06	385	Rossi, A. da M.	9	T1	E07	289
Robert, H.	9	T1	E07	293	Rossi, A. da M.	9	T1	E07	291
Robert, H. R.	9	T1	E07	292	Rossi, A. da M.	9	T1	E07	291
Roberto Neto, O.	8	T1	E08	12	Rossi, A. M.	9	T1	E07	287
Robilotta, C. C.	10	T1	E02	53	Rossi, A. M.	9	T1	E07	290
Roccatto, A.	8	M1	09	206	Rossi, A. M.	9	T1	E07	290
Rocco, M. L. M.	10	T1	E08	34	Rossi, A. M.	9	T1	E07	291
Rocha Filho, T. M. da	8	T1	E08	9	Rossi, A. M.	9	T1	E07	294
Rocha Filho, T. M. da	10	T1	E08	31	Rossi, G.	10	T1	E13	341
Rocha, A.	8	M1	05	147	Rossi, J. C.	8	M2	13	301
Rocha, E.	9	M2	12	115	Rossi, J. C.	8	T1	E13	303
Rocha, L. R. B.	8	T1	E08	11	Rossi, J. C.	8	T1	E13	303
Roda, V. O.	8	T1	E05	151	Rossi, J. C.	8	T1	E13	304
Rodrigues Jr, P.	9	T1	E10	359	Rossi, J. C.	9	T1	E13	322
Rodrigues Jr, P.	10	M1	04	360	Rossi, J. C.	8	T1	E13	309
Rodrigues Junior, D.	9	T1	E10	357	Rossi, J. C.	8	T1	E13	316
Rodrigues, A. M. G. D.	8	T1	E06	181	Rossi, W. de	10	T1	E07	264
Rodrigues, A. R.	10	T1	E04	96	Rossi, W. de	9	T1	E05	158
Rodrigues, C. G.	10	T1	E10	132	Rotta, R. T.	9	T1	E05	156
Rodrigues, C. L. C.	9	T1	E10	359	Rouviere, J. L.	10	M1	09	227
Rodrigues, C. W.	9	T1	E13	326	Roux, S.	8	M2	12	99
Rodrigues, E.	9	T1	E04	253	Roversi, J. A.	9	T1	E04	255
Rodrigues, J. de A.	9	T1	E06	193	Roversi, J. A.	10	M1	02	258
Rodrigues, J. R. F. M.	8	M2	02	244	Rovira, P.	10	T1	E03	80
Rodrigues, K. C.	8	M1	09	206	Rovira, P.	10	T1	E13	339
Rodrigues, M. G.	10	M1	05	161	Rozkdestvensky, I. V.	9	M1	12	114
Rodrigues, N. A. S.	10	T1	E07	260	Rubinger, R. M.	9	T1	E13	326
Rodrigues, N. A. S.	10	T1	E07	260	Rubner, M. F.	10	T1	E11	279
Rodrigues, N. A. S.	8	T1	E05	147	Rubner, M. F.	8	M1	11	267
Rodrigues, N. A. S.	10	T1	E07	260	Rubo, E. A. A.	9	T1	E10	355
Rodrigues, N. A. S.	10	T1	E07	261	Rubo, E. A. A.	8	T1	E04	351
Rodrigues, N. A. S.	9	T1	E06	195	Rubo, E. A. A.	8	T1	E04	352
Rodrigues, P.	10	M2	04	361	Ruf, T.	10	M1	13	332
Rodrigues, P. A. M.	9	T1	E13	324	Ruggiero Neto, J.	10	T1	E02	55

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Ruggiero, J.	8	M2	03	37	Sano, W.	9	T1	E07	286
Ruggiero, J. R.	10	T1	E02	56	Sano, W.	9	T1	E07	286
Ruiz-Prieto, J. M.	8	T1	E06	185	Sano, W.	8	T1	E02	42
Ruppenthal, A. R.	8	T1	E12	210	Sant'ana, Z. A. de	10	T1	E03	173
Rupp, R. A.	8	M2	05	241	Santa-Helena, E. L. de	9	T1	E12	121
Rusbueldt, D.	10	T1	E07	266	Santana, R. C. de	9	M2	04	285
Russo, L. C.	9	T1	E01	73	Santiago, R. B.	9	T1	E13	326
Saavedra, A. A.	8	M2	02	244	Santi, C. E.	10	T1	E12	235
Saavedra, A. A.	8	M1	02	240	Santilli, C. V.	9	M1	07	188
Sachrajda, A. S.	10	M2	13	334	Santin Filho, O.	8	T1	E07	247
Sachs, A. C.	10	T1	E07	262	Santo, A. M. do E.	9	T1	E01	74
Sairanen, O.	9	T1	E08	20	Santo, A. M. do E.	9	T1	E01	75
Sairanen, O.	9	T1	E08	20	Santo, L. L. do E.	9	T1	E06	193
Sairanen, O.	9	M2	01	15	Santos Filho, A. R. G.	9	M2	09	219
Sairanen, O.	9	T1	E08	21	Santos, A. C. F. dos	10	T1	E08	32
Saitovitch, E. B.	9	T1	E10	355	Santos, A. D.	9	T1	E09	223
Saitovitch, E. B.	8	T1	E04	352	Santos, A. D. dos	10	T1	E12	234
Saitovitch, E. B.	10	T1	E12	237	Santos, A. D. dos	10	T1	E12	235
Saitovitch, E. B.	8	T1	E12	217	Santos, A. D. dos	10	T1	E12	235
Saitovitch, H.	8	M2	08	62	Santos, A. D. dos	10	T1	E12	236
Saitovitch, H.	8	M2	08	61	Santos, A. D. dos	10	T1	E12	236
Sakai, T.	8	T1	E03	370	Santos, A. D. dos	9	T1	E09	224
Sakamoto, W. K.	9	T1	E02	273	Santos, A. M. dos	10	T1	E08	30
Sakamoto, W. K.	9	T1	E02	273	Santos, C. A. dos	9	T1	E03	376
Sakamoto, W. K.	9	T1	E02	273	Santos, C. A. dos	9	M2	06	374
Sakamoto, W. K.	9	T1	E02	273	Santos, C. A. dos	9	T1	E03	376
Sakamoto, W. K.	9	T1	E02	274	Santos, C. A. dos	10	M1	09	228
Sakane, K. K.	9	T1	E08	16	Santos, C. A. dos	8	T1	E06	181
Salazar, D. G. P.	9	T1	E02	277	Santos, C. A. dos	9	M1	07	185
Salem-Sugui Jr, S.	10	M2	04	362	Santos, C. A. M.	9	T1	E10	356
Sales, J. A. de	10	T1	E02	52	Santos, C. A. M. dos	10	T1	E06	202
Salgado, E. G. C.	9	T1	E01	73	Santos, C. dos	10	T1	E08	26
Salim, V.	8	M2	06	365	Santos, D. D.	8	T1	E08	11
Salinas, S.	9	T1	E12	123	Santos, D. I. dos	9	T1	E10	355
Salinas, S.	8	T1	E10	102	Santos, D. I. dos	8	T1	E04	351
Salinas, S.	10	T1	E10	133	Santos, D. I. dos	8	T1	E04	352
Salinas, S. R. A.	9	T1	E12	124	Santos, D. R.	10	T1	E04	96
Salinas, S. R. de A.	9	T1	E12	122	Santos, D. R.	9	M2	07	188
Salles, E. O. T.	9	T1	E06	194	Santos, D. R.	8	M2	10	88
Salvadori, M. C.	9	T1	E03	377	Santos, E. J. P.	8	T1	E13	313
Salvadori, M. C.	9	T1	E03	378	Santos, F. L. dos	8	M2	11	268
Salvadori, M. C.	9	T1	E03	379	Santos, G. C. dos	10	T1	E09	142
Salveti, A. R.	10	T1	E06	199	Santos, J. H. R. dos	10	T1	E08	27
Samad, R. E.	9	T1	E05	158	Santos, M.	10	T1	E10	133
Sampaio, A. J. da C.	10	T1	E13	343	Santos, M. B. L.	10	T1	E03	176
Sampaio, A. J. da C.	10	T1	E13	343	Santos, M. C. dos	9	T1	E02	275
Sampaio, E. S. de	10	M1	08	78	Santos, M. C. dos	10	T1	E11	281
Sampaio, J. F.	9	T1	E13	324	Santos, M. C. dos	9	T1	E02	276
Sampaio, J. F.	8	T1	E13	312	Santos, M. C. dos	9	M2	09	219
Sampaio, J. F.	8	T1	E13	316	Santos, M. S. dos	9	T1	E08	19
Sampaio, J. F. de	8	T1	E13	313	Santos, M. S. dos	9	M1	01	13
Sampaio, N. P.	9	T1	E06	194	Santos, R. A.	10	M1	06	382
Sanchez-Delgado, R.	8	M2	01	5	Santos, R. J. V. dos	9	T1	E12	126
Sanchez, A.	10	T1	E04	95	Santos, R. M. Z. dos	8	T1	E09	108
Sander, R. B.	10	T1	E03	175	Santos, R. M. Z. dos	8	M2	12	100
Sangiorge, C. L.	8	M2	11	269	Santos, R. R. dos	10	T1	E09	143

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Santos, R. R. dos	8	M2	04	349	Schramm, D. U. da S.	9	T1	E07	291
Santos, R. R. dos	9	T1	E11	118	Schreier, S.	9	M1	03	44
Santos, R. R. dos	8	T1	E12	216	Schreiner, M. A.	10	T1	E03	172
Santos, R. T.	9	T1	E02	275	Schreiner, M. A.	10	T1	E03	176
Santos, S. E. dos	9	T1	E05	159	Schreiner, W.	10	M1	09	228
Santos, T. E. A.	8	T1	E13	314	Schreiner, W. H.	10	M1	09	228
Santos, V. dos	9	T1	E07	287	Schreiner, W. H.	8	T1	E03	367
Santos, V. H. F. dos	9	M2	07	189	Schreiner, W. H.	8	T1	E03	367
Santos, W. M. S.	10	M1	05	161	Schreiner, W. H.	9	T1	E03	378
Sarma, S. das	8	T1	E13	315	Schreiner, W. H.	10	M1	06	383
Sarthour, R.	10	T1	E12	235	Schreiner, W. H.	10	M1	06	383
Sarthour, R.	8	T1	E05	150	Schulz, P. A.	10	M2	13	333
Sartorelli, J. C.	9	T1	E07	288	Schulz, P. A. B.	8	T1	E13	308
Sartorelli, J. C.	9	T1	E07	288	Schulz, P. A. B.	9	T1	E13	323
Sartorelli, J. C.	9	T1	E07	289	Schulz, P. A. B.	10	M1	13	333
Sartorelli, J. C.	10	T1	E10	135	Schwab, C.	10	T1	E07	260
Sartorelli, J. C.	10	T1	E10	135	Schwab, C.	10	T1	E07	260
Sartori, C. S.	10	T1	E08	28	Schwab, C.	8	T1	E05	147
Satulovsky, J. E.	8	T1	E09	110	Schwab, C.	10	T1	E07	260
Sauerwein, R. A.	9	T1	E11	119	Schweer, B.	10	T1	E07	266
Saul, C. K.	10	M1	06	383	Schweikert, E. A.	8	T1	E03	368
Sauvage-Simkin, M.	10	T1	E13	341	Scolfaro, L. M. R.	9	T1	E13	324
Sawada, L.	8	T1	E01	65	Scolfaro, L. M. R.	9	T1	E13	325
Sbampato, M. E.	9	T1	E08	16	Scolfaro, L. M. R.	9	T1	E13	327
Scalabrin, A.	10	M2	01	24	Scolfaro, L. M. R.	9	T1	E13	328
Scalabrin, A.	8	M2	02	241	Scolfaro, L. M. R.	9	T1	E13	329
Scalabrin, A.	9	T1	E08	21	Scorzelli, R. B.	8	T1	E04	351
Scalabrin, A.	9	M2	01	15	Scorzelli, R. B.	9	T1	E09	222
Scalabrin, A.	10	T1	E08	27	Scorzelli, R. B.	8	T1	E06	184
Scalvi, L. V. de A.	9	T1	E13	325	Scorzelli, R. B.	8	M1	04	347
Scalvi, R. M. F.	8	T1	E06	181	Segransan, P.	10	M2	11	299
Scalvi, R. M. F.	8	M2	07	178	Selzer, S.	9	T1	E12	124
Scalvi, R. M. F.	8	M2	07	179	Selzer, S.	10	T1	E09	142
Scarminio, J.	10	T1	E12	233	Sena, S. C. de	9	T1	E08	16
Schaf, J.	9	T1	E10	359	Sermage, B.	10	T1	E13	340
Schaf, J.	10	M1	04	360	Serra, K. C.	10	M1	08	78
Schaf, J.	10	M2	04	361	Shacham-Diamond, Y.	8	T1	E13	314
Schammass, A.	10	T1	E07	264	Shapira, Y.	9	M1	12	113
Scheid, V. H. B.	10	T1	E07	266	Sharipov, F.	8	T1	E08	6
Schelp, L. F.	8	T1	E03	370	Sharma, A.	8	M1	02	239
Scherer, C.	10	T1	E12	230	Sharma, N. K.	9	T1	E08	21
Scherer, C.	8	M2	07	179	Sharma, S. S.	9	T1	E08	21
Scherer, C.	10	T1	E10	137	Sheard, F.	9	T1	E13	330
Scherer, C.	8	T1	E03	371	Shibli, S. M.	8	M2	13	301
Schiffino, A. S.	10	T1	E07	263	Shibli, S. M.	8	T1	E13	314
Schifino, J.	9	T1	E09	224	Shibli, S. M.	9	M1	10	167
Schiwietz, G.	10	M2	01	24	Shida, C. S.	8	M2	03	38
Schmal, M.	8	M2	06	365	Shigue, C. Y.	9	T1	E07	293
Schmidt, C.	10	T1	E03	80	Shigue, C. Y.	9	T1	E10	358
Schmidt, J. E.	8	T1	E05	149	Shigue, C. Y.	9	T1	E10	358
Schmidt, J. E.	8	T1	E03	370	Shinjo, T.	10	T1	E12	237
Schmidt, T. M.	9	T1	E13	327	Shukla, M. M.	8	M2	07	178
Schmidt, T. M.	9	T1	E13	328	Sibrao, E. R.	10	T1	E13	345
Schneider, S.	9	T1	E10	357	Siddons, D. P.	8	M1	10	85
Schon, C. G.	9	M2	07	190	Sigaud, G. M.	10	M2	01	25
Schon, C. G.	8	T1	E06	184	Silva Filho, A. C. da	10	M2	03	50

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Silva Jr, E. F. da	9	T1	E03	380	Silva, J. R. G. da	8	T1	E06	181
Silva Jr, O. S.	10	T1	E08	32	Silva, J. R. G. da	8	T1	E06	181
Silva Sobrinho, A. S. da	9	T1	E03	375	Silva, L. A. da	9	T1	E03	381
Silva, A. C. L.	10	T1	E06	204	Silva, L. C. da	10	T1	E09	142
Silva, A. F. da	10	T1	E13	336	Silva, L. da	10	T1	E09	143
Silva, A. F. da	10	T1	E13	336	Silva, L. M.	10	M2	05	163
Silva, A. F. da	8	T1	E13	310	Silva, L. R. da	10	T1	E08	32
Silva, A. F. da	8	T1	E13	310	Silva, L. R. da	8	M2	12	99
Silva, A. F. da	9	T1	E13	328	Silva, L. R. da	9	M2	12	115
Silva, A. F. da	10	M1	13	332	Silva, L. R. da	8	T1	E09	111
Silva, A. J. G. C.	10	T1	E05	93	Silva, M. A. A.	9	T1	E13	324
Silva, A. L.	8	M2	11	269	Silva, M. A. P.	8	M1	08	59
Silva, A. M. M. da	8	T1	E06	183	Silva, M. de A. P. da	9	T1	E06	192
Silva, A. V. B. da	10	T1	E13	336	Silva, M. de A. P. da	9	T1	E03	381
Silva, C. A. A. da	8	T1	E12	215	Silva, M. de A. P. da	8	T1	E13	316
Silva, C. R. da	8	T1	E09	106	Silva, M. I. N. da	9	T1	E13	326
Silva, C. R. da	8	T1	E09	106	Silva, N. C. da	8	T1	E05	150
Silva, C. R.: M. da	8	T1	E06	182	Silva, O. M. M.	10	T1	E06	203
Silva, C. R. S. da	8	M2	07	179	Silva, P. R.	9	T1	E10	356
Silva, D. L. N.	8	T1	E07	245	Silva, P. R. da	8	M2	11	269
Silva, E. C. da	9	T1	E06	193	Silva, P. R. J.	8	M2	08	62
Silva, E. C. da	8	T1	E02	41	Silva, P. R. J.	8	M2	08	61
Silva, E. C. da	8	T1	E12	215	Silva, R. B. da	10	M2	05	163
Silva, E. C. da	10	T1	E12	236	Silva, R. C. da	8	T1	E03	369
Silva, E. C. F. da	10	T1	E13	344	Silva, R. C. da	9	T1	E13	327
Silva, E. G. da	10	M1	11	295	Silva, S. M.	9	T1	E02	274
Silva, E. G. da	9	T1	E07	289	Silva, S. W. da	9	T1	E13	322
Silva, E. P. da	10	M2	01	24	Silva, V. A.	10	T1	E06	203
Silva, E. Z. da	10	M2	04	362	Silva, X. A. da	8	T1	E12	211
Silva, F. C. S. da	10	M2	09	229	Silva, X. A. da	10	T1	E12	232
Silva, F. L. B. da	9	T1	E03	377	Silveira Junior, J. B.	9	T1	E05	159
Silva, F. L. B. da	10	T1	E10	136	Silveira Junior, L.	10	M2	05	163
Silva, F. W. O. da	10	M2	10	90	Silveira, C. A. B. da	10	T1	E07	260
Silva, F. W. O. da	10	T1	E05	92	Silveira, E. F. da	8	T1	E03	368
Silva, G. C.	8	T1	E02	41	Silveira, E. F. da	8	T1	E03	368
Silva, G. M. e	9	T1	E02	277	Silveira, E. F. da	10	T1	E08	31
Silva, H. F. da	9	T1	E06	194	Silveira, E. F. da	8	T1	E03	371
Silva, H. F. da	8	M2	07	180	Silveira, E. F. da	10	M2	06	384
Silva, H. F. da	8	M1	02	239	Silveira, E. F. da	8	M2	03	38
Silva, I. G. da	9	M2	01	14	Silveira, M.	10	T1	E02	54
Silva, I. P. C. e	9	T1	E12	125	Silveira, M. F. D.	10	T1	E06	199
Silva, I. R.	9	M2	03	47	Silveira, M. F. da	10	T1	E06	198
Silva, J. A. P. da	10	T1	E07	263	Simoes, A. da R.	8	T1	E12	215
Silva, J. B.	9	M1	09	218	Simonetti, R.	8	T1	E09	108
Silva, J. B. da	8	T1	E12	211	Simon, G.	9	T1	E03	376
Silva, J. C. M. da	9	T1	E04	254	Simon, G.	9	M2	06	374
Silva, J. C. M. da	10	M1	02	257	Simon, G.	9	T1	E03	376
Silva, J. C. M. da	9	T1	E04	254	Simon, G.	10	T1	E12	231
Silva, J. G. da	10	M1	11	294	Simons, B. D.	9	M1	02	318
Silva, J. G. M. da	10	T1	E10	135	Sini, S. M.	8	T1	E05	150
Silva, J. H. D. da	9	T1	E03	378	Sipahi, G. M.	9	T1	E13	329
Silva, J. K. L. da	8	T1	E06	181	Siqueira, A. F.	9	T1	E06	194
Silva, J. K. L. da	10	M1	12	128	Sirenko, V. A.	9	T1	E10	357
Silva, J. K. L. da	10	T1	E09	143	Sirera, L. E. P.	9	T1	E13	325
Silva, J. K. L. da	9	T1	E09	224	Sirotti, F.	10	T1	E13	341
Silva, J. L. F. da	10	T1	E09	139	Sitter, H.	9	M2	08	69

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Siu-Li, M.	8	M1	08	59	Souza, J. C. de	10	T1	E13	336
Siu-Li, M.	9	M2	04	285	Souza, J. M. de	10	T1	E11	282
Skorvanek, I.	9	T1	E09	221	Souza, J. P. de	10	M1	06	382
Slaets, J. F. W.	8	T1	E08	9	Souza, J. R.	8	T1	E05	151
Slomka, M. R.	9	T1	E01	73	Souza, L. G. de	10	M1	05	160
Soares, D. A. W.	9	T1	E13	326	Souza, M. A. R.	9	T1	E13	322
Soares, D. A. W.	9	M1	02	318	Souza, M. A. R.	8	T1	E13	309
Soares, D. A. W.	9	T1	E13	330	Souza, M. A. R.	8	T1	E13	315
Soares, E. A.	8	M2	06	366	Souza, M. A. S. de	8	T1	E08	11
Soares, I. M.	10	T1	E08	32	Souza, M. de F. Q. de	8	M1	09	207
Soares, J. A. N. de T.	9	M2	08	70	Souza, P. H. de	9	T1	E07	292
Soares, J. A. N. de T.	9	T1	E01	75	Souza, P. H. de	10	T1	E11	282
Soares, M. R. F.	9	T1	E03	376	Souza, P. L.	10	T1	E13	345
Soares, T. T.	8	T1	E06	183	Souza, P. L. de	10	T1	E13	340
Sobral, R. R.	8	T1	E12	211	Souza, P. L. de	10	T1	E13	342
Sobral, R. R.	10	T1	E12	232	Souza, P. L. de	10	T1	E13	342
Sokal, A. D.	10	M1	12	127	Souza, P. L. de	8	T1	E13	312
Sokolov, S. S.	10	M2	06	384	Souza, R. C. de	8	T1	E06	183
Solano, S. G. V. C.	8	T1	E01	64	Souza, R. E. de	10	M2	11	297
Solano, V. C.	10	T1	E03	81	Souza, R. E. de	10	M2	11	298
Solano, V. C.	10	M1	08	77	Souza, R. F.	8	M1	02	239
Solano, V. C.	8	M1	08	60	Souza, R. G. de	9	M1	11	271
Solano, V. C.	8	T1	E07	248	Souza, R. R. de	8	T1	E05	149
Soler, M. A. F.	10	M1	05	160	Souza, R. R. de	8	M1	09	207
Sombra, A. B.	8	M2	08	61	Souza, S. D.	8	M1	09	207
Sombra, A. S. B.	10	M2	08	78	Souza, S. D. de	9	T1	E09	225
Sombra, A. S. B.	10	M2	08	80	Souza, S. J. de F. e	9	M2	05	153
Son, N. H.	8	T1	E13	303	Souza, S. S. de	8	T1	E01	65
Sordo, J.	10	T1	E04	95	Speller, C. V.	9	T1	E08	22
Sosman, L. P.	9	T1	E08	22	Speziali, N. L.	10	T1	E04	95
Souche, Y.	10	T1	E12	236	Speziali, N. L.	10	T1	E05	92
Sousa, A. A.	8	T1	E08	9	Speziali, N. L.	10	M2	10	91
Sousa, A. J. F. de	8	T1	E09	109	Speziali, N. L.	10	T1	E05	93
Sousa, A. J. F. de	8	T1	E10	103	Spina, F. D.	9	T1	E05	159
Sousa, D. M. de	9	T1	E08	19	Spodine, E.	10	T1	E04	94
Sousa, J. R. de	8	T1	E10	104	Stariolo, D. A.	8	T1	E09	106
Sousa, J. R. de	8	T1	E10	104	Stein-Barana, A. C. M.	8	T1	E12	213
Sousa, J. R. de	9	T1	E11	118	Stein-Barana, A. C. M.	8	T1	E12	214
Sousa, K. M. O. de	8	T1	E09	110	Stepanov, V.	8	M1	01	165
Sousa, P. L.	9	M2	03	46	Stilck, J. F.	8	T1	E10	104
Sousa, R. R. de	9	M2	04	285	Stilck, J. F.	10	M2	12	130
Souto, A. L. C. F.	8	T1	E02	41	Stilck, J. F.	8	T1	E10	105
Souza Junior, P. A. de	9	T1	E06	194	Stipp, A. C.	9	M2	03	46
Souza, A. L. de	8	T1	E06	185	Stroud, D. G.	8	T2	09	385
Souza, A. M. C. de	10	T1	E10	131	Stroud, D. G.	10	M1	04	360
Souza, A. R. de	9	T1	E03	375	Strumia, F.	10	T1	E07	260
Souza, A. R. de	9	T1	E03	377	Strumia, F.	9	M2	01	15
Souza, A. R. de	9	M2	01	15	Studart, N.	8	M2	13	302
Souza, A. R. de	9	T1	E08	22	Studart, N.	10	M2	06	384
Souza, C. F. de	10	T1	E13	342	Studart, N.	8	M2	13	301
Souza, C. F. de	9	T1	E01	74	Studart, N.	8	M1	13	300
Souza, C. F. de	9	T1	E01	76	Sudano, J. P.	9	T1	E06	191
Souza, D. do N.	10	T1	E06	203	Sugg, B.	8	M2	05	241
Souza, G. F.	10	T1	E04	95	Sundqvist, B. U. R.	10	T1	E11	279
Souza, G. G. B. de	10	M1	01	23	Sunta, C. M.	8	T1	E01	67
Souza, G. G. B. de	10	T1	E08	34	Surdutovich, G. I.	10	M2	13	334

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Surdutovich, G. I.	9	T1	E08	18	Telles, G. D.	10	T1	E11	278
Surdutovich, G. I.	9	T1	E08	18	Temkin, H.	10	M1	13	331
Surdutovich, G. I.	8	T1	E07	246	Teodosio, J. R.	8	T1	E06	182
Surdutovich, G. I.	9	M2	02	252	Terin, P. S. D.	10	T1	E03	176
Surdutovich, G. I.	9	M2	02	252	Terra, J.	8	M2	01	5
Suzuki, P. A.	8	M1	04	348	Terra, J.	8	T1	E08	8
Svensson, S.	9	T1	E08	20	Terrazos, L. A.	8	T1	E12	214
Svensson, S.	9	T1	E08	20	Terrile, M. C.	9	M2	04	285
Svensson, S.	9	M2	01	15	Terrile, M. C.	9	M2	04	285
Svensson, S.	9	T1	E08	21	Terrille, M. C.	9	M2	04	285
Swart, J. W.	8	T1	E13	305	Terstoff, J.	9	M1	02	317
Swart, J. W.	8	T1	E13	314	Teschke, O.	10	T1	E13	338
Tabak, M.	8	T1	E02	39	Teso, A.	10	T1	E02	57
Tabak, M.	10	M1	11	297	Tessler, L.	10	T1	E03	80
Tabak, M.	8	T1	E02	40	Tessler, L. R.	10	M2	04	361
Tabak, M.	8	M2	03	37	Theumann, A. G. R. de	8	T1	E09	112
Tabak, M.	8	T1	E02	43	Theumann, W. K.	8	T1	E09	105
Tabosa, J. W.	10	T1	E07	265	Theumann, W. K.	8	M2	12	100
Tabosa, J. W. R.	9	M2	02	251	Theumann, W. K.	8	T1	E09	110
Tabosa, J. W. R.	9	M2	02	251	Thieghi, L. T.	9	M1	10	167
Tabosa, J. W. R.	10	T1	E07	265	Tholence, J. L.	9	T1	E10	359
Takahashi, E. K.	9	T1	E13	327	Timm, C. A.	10	T1	E12	230
Takahashi, E. K.	9	T1	E13	328	Timm, C. A.	9	M2	06	374
Takeuchi, A. Y.	10	T1	E12	234	Tinto, M. H.	8	T1	E02	43
Takeuchi, A. Y.	9	T1	E09	223	Toginho Filho, D. de O.	9	T1	E05	156
Tamargo, M. C.	10	T1	E13	339	Toledo, A. O. de	10	T1	E08	30
Tamarit, F. A.	8	T1	E09	106	Tolentino, H.	8	M1	10	87
Tamarit, F. A.	8	T1	E09	106	Tolentino, H.	8	M1	10	86
Tamarit, F. A.	8	T1	E09	107	Tolentino, H.	10	T1	E04	94
Tamashiro, M.	9	T1	E12	123	Tolentino, H.	8	M1	10	86
Tamashiro, M.	8	T1	E10	102	Tolentino, H.	8	T1	E03	371
Tamashiro, M.	10	T1	E10	133	Tolentino, H. C. N.	10	T1	E04	96
Tamura, E.	8	M1	10	87	Tome, T.	8	M2	12	101
Tannus, A.	10	M1	11	296	Tome, T.	8	T1	E09	110
Tannus, A.	10	M1	11	296	Tominaga, T. T.	8	T1	E02	40
Tannus, A.	9	T1	E07	294	Torikachvili, M. S.	9	T1	E10	356
Tarelho, L. V. G.	10	T1	E03	83	Torralba, J. M.	8	T1	E06	185
Tarelho, L. V. G.	10	T1	E03	83	Torres, J. H. S.	8	M1	04	348
Tatumi, S. H.	8	T1	E01	65	Torriani, I. C. L. de	9	T1	E01	71
Taveira, A. M. A.	10	T1	E08	29	Torriani, I. L.	8	M2	10	87
Taylor, K. N. R.	10	M2	04	361	Torriani, I. L.	10	T1	E13	338
Taylor, R. P.	10	M2	13	334	Torriani, I. L.	10	T1	E04	96
Tchoubar, D.	10	T1	E06	201	Torriani, I. L.	10	T1	E04	96
Teixeira Rabelo, J. N.	10	T1	E10	132	Torriani, I. L.	9	M1	07	187
Teixeira, A. V. N. C.	10	T1	E11	280	Torriani, I. L.	9	M2	07	188
Teixeira, C. V.	9	M1	10	168	Torriani, I. L.	8	M2	10	88
Teixeira, F. L.	9	T1	E04	256	Torriani, I. L.	9	M1	03	45
Teixeira, F. L.	9	T1	E05	158	Toto, J. L.	9	T1	E02	277
Teixeira, S. R.	10	M1	09	227	Toto, J. L.	9	M2	11	272
Teixeira, S. R.	9	T1	E03	378	Toto, T. T.	9	T1	E02	277
Teixeira, S. R.	9	M2	06	373	Toto, T. T.	9	M2	11	272
Tejima, H.	8	T1	E06	181	Tourillon, G.	9	M1	07	186
Tejima, H.	8	T1	E06	181	Tourinho, F. A.	10	T1	E03	170
Teles, D. L.	10	T1	E06	201	Tourinho, F. A.	10	T1	E03	170
Telez, D.	10	T1	E06	201	Tourinho, F. A.	8	M1	01	166
Telles, E. M.	8	M2	02	241	Trautwein, A. X.	10	T1	E12	233

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Trautwein, A. X.	8	T1	E02	40	Varela, J. M.	10	T1	E04	95
Trava-Airoldi, V. J.	10	T1	E06	199	Vargas, H.	8	T1	E02	41
Trava-Airoldi, V. J.	9	T1	E03	379	Vargas, H.	8	T1	E12	215
Trava-Airoldi, V. J.	10	M1	06	382	Vargas, H.	10	T1	E12	236
Trava-Airoldi, V. J.	9	M1	08	69	Vargas, H.	9	T1	E08	22
Travieso, G.	8	T1	E08	9	Vasconcellos, M. A. Z.	9	T1	E03	376
Tretiakov, N.	8	M2	06	365	Vasconcellos, M. A. Z.	9	M2	06	374
Tretiakov, N.	8	T1	E03	366	Vasconcellos, M. A. Z.	9	T1	E03	376
Tretiakov, N. P.	10	T1	E10	132	Vasconcellos, M. A. Z.	8	T1	E03	371
Tretiakov, N. P.	10	T1	E09	140	Vasconcelos, D. S. D.	10	T1	E09	144
Tretiakov, N. T.	10	T1	E10	133	Vasconcelos, D. S. de	10	T1	E05	93
Tribuzy, C. V.	10	T1	E12	234	Vasconcelos, D. S. de	9	T1	E11	118
Trippe, S. C.	9	T1	E03	377	Vasconcelos, E. A. de	10	M2	13	335
Triques, A. L. C.	10	M1	13	331	Vasconcelos, E. F.	8	T1	E12	213
Tronconi, A. L.	10	T1	E03	170	Vasconcelos, G. de	9	T1	E06	195
Tronconi, A. L.	10	T1	E03	170	Vasconcelos, S. S.	10	M1	05	160
Troncon, L. E. A.	9	M2	03	46	Vasilevskiy, M. I.	10	T1	E13	337
Troper, A.	8	T1	E12	210	Vayrynen, J.	9	T1	E08	20
Troper, A.	8	T1	E12	212	Vaz, C. M. P.	9	T1	E05	156
Troper, A.	8	T1	E12	213	Veiga, P. F. da	9	M1	12	113
Tsai, S. H.	9	T1	E12	124	Veiga, W.	9	T1	E06	191
Tsallis, C.	8	T1	E09	106	Velasquez, E. L. Z.	10	T1	E05	91
Tsallis, C.	9	T1	E12	123	Velasquez, R.	8	T1	E13	309
Tsallis, C.	9	M2	12	115	Veliz, R. O.	8	T1	E05	151
Tsallis, C.	8	T1	E09	111	Venegas, P. A.	9	T1	E10	359
Tsallis, C.	9	T2	12	389	Veneziano, A. L.	10	T1	E02	56
Tsunoda, E. S.	9	T1	E02	273	Venezuela, P.	9	M1	02	318
Turchiello, R. de F.	9	M1	10	168	Ventura, D. R.	10	T1	E05	93
Turci, C.	10	T1	E08	34	Ventura, L.	9	T1	E05	156
Tuyarot, D. E.	8	T1	E13	306	Ventura, L.	9	M2	05	153
Tuyarot, D. E.	10	T1	E13	338	Verdugo, J. E.	10	M1	05	160
Udron, D.	8	M1	10	86	Vermelho, M. V. D.	8	T1	E07	248
Ueda, V. L. M.	10	T1	E03	176	Vermelho, M. V. D.	10	T1	E07	266
Ugarte, D.	10	T1	E04	94	Viana, N. B.	8	M2	11	269
Umisedo, N. K.	8	T1	E01	67	Vianna, J. D. M.	8	M2	01	5
Urahata, S. M.	8	T1	E09	106	Vianna, J. D. M.	8	T1	E08	10
Urbani, R.	10	T1	E02	56	Vianna, J. D. M.	8	T1	E08	10
Urbano, A.	10	T1	E12	233	Vianna, S. S.	9	M2	02	251
Urruchi, W. I.	9	M2	05	155	Vianna, S. S.	9	M2	02	251
Valadares, E. de C.	9	T1	E13	330	Vianna, S. S.	10	T1	E07	265
Valdivia, J. A.	9	T1	E13	320	Vianna, S. S.	10	T1	E07	265
Valente, G. C.	10	T1	E06	204	Vicentin, F.	8	T1	E03	371
Valente, L. C. G.	10	M2	05	163	Vicentini, E.	8	T1	E08	8
Valera, M. C.	10	T1	E06	199	Vidal, A.	10	T1	E03	80
Valerio, M. E. G.	10	T1	E03	84	Vidoto, E. A.	10	M1	11	294
Valerio, M. E. G.	8	T1	E01	66	Vidoto, E. L. G.	10	M1	11	295
Valerio, M. E. G.	8	M1	08	59	Vidoto, E. L. G.	9	T1	E07	289
Valerio, M. E. G.	10	T1	E06	203	Vidoto, L. G.	10	M1	11	294
Valerio, M. E. G.	8	T1	E01	66	Viegas, A. da C.	8	T1	E05	149
Valerio, M. E. G.	8	T1	E01	66	Viegas, A. da C.	8	T1	E03	370
Valet, T.	10	M2	09	229	Vieira Jr, N. D.	10	T1	E07	264
Vallada, F. H. P.	9	T1	E05	156	Vieira Junior, N. D.	9	T1	E05	158
Valois, R.	8	T1	E05	150	Vieira Junior, N. D.	9	T1	E05	158
Vanin, J. A.	10	T1	E03	173	Vieira Junior, N. D.	8	T1	E01	65
Varanda, W. A.	8	M1	03	35	Vieira Junior, N. D.	10	T1	E07	264
Varela, A. T.	9	T1	E01	75	Vieira Junior, N. D.	10	M1	08	77

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Vieira Junior, N. D.	8	M1	08	59	Weiner, J.	9	T1	E08	17
Vieira Junior, N. D.	9	M2	03	47	Weiner, J.	9	T1	E08	17
Vieira, E. M.	8	T1	E02	40	Weiner, J.	9	T1	E08	18
Vieira, F. de M. C.	10	T1	E02	54	Weinketz, S.	10	T1	E10	136
Vieira, F. de M. C.	10	T1	E02	56	Weisbuch, G.	8	M2	12	100
Vieira, G. S.	8	T1	E13	306	Weisz, J.	8	T1	E13	306
Vieira, M. M. F.	8	T1	E01	65	Welzel-Gerth, S.	8	M2	09	207
Vieira, M. M. F.	10	M1	08	77	Werneck, A. S.	8	M2	01	5
Vieira, S. R.	8	T1	E09	108	Werneck, A. S.	8	T1	E08	10
Vilarim, P. R.	10	T1	E03	172	Werneck, A. S.	8	T1	E08	10
Vilar, L. C. Q.	10	T1	E10	131	Werneck, M. M.	10	M2	05	163
Vilela, A. C. F.	8	T1	E06	183	Werneck, M. M.	10	M2	05	164
Vilela, M. J.	10	T1	E02	52	Westphal, C. H.	8	T1	E04	353
Villaverde, A. G. J. B.	8	M2	02	243	Wetter, N. U.	10	T1	E07	264
Vinha, D.	9	M2	03	47	Wiendl, F. M.	8	M1	05	146
Vitlina, R. Z.	9	T1	E08	18	Winkler, H.	8	T1	E02	40
Vitlina, R. Z.	8	T1	E07	246	Winnewisser, B.	9	M2	01	15
Vitor Sobrinho, E.	10	M1	11	296	Winnewisser, M.	9	M2	01	15
Vlasilev, O.	9	T1	E12	121	Wolford, D. J.	10	M1	13	331
Vollet, D. R.	9	T1	E06	192	Woodruff, D. P.	8	T1	E03	372
Vollet, D. R.	9	T1	E06	192	Woodruff, D. P.	9	M1	06	373
Vollet, D. R.	9	T1	E06	192	Wreszinski, W. F.	9	T1	E11	117
Vollhardt, D.	9	M1	09	217	X. Junior, M. M.	8	T1	E09	107
Von-Der-Weid, J. P.	8	M2	02	244	Xavier Jr, I. M.	8	T1	E09	109
Vugman, N. V.	9	T1	E07	291	Xia, S. K.	9	T1	E09	221
Vugman, N. V.	9	T1	E07	293	Xia, S. K.	9	T1	E03	379
Vugman, N. V.	9	M2	04	284	Xie, C.	9	M2	01	14
Vugman, N. V.	9	M2	04	284	Xie, C.	9	T1	E08	21
Vugman, N. V.	9	T1	E07	294	Yamamoto, T.	8	T1	E03	370
Vugman, N. V.	9	M1	04	283	Yang, D. H.	9	M2	01	14
Wahlbuhl, C. A. R. S.	10	T1	E07	260	Yavich, B.	8	T1	E13	312
Wajnberg, E.	8	T1	E02	40	Yeatman, E.	9	M1	07	187
Wajnberg, E.	8	T1	E02	41	Yokoi, C. S. O.	8	T1	E09	106
Wajnberg, E.	8	M2	03	37	Yokoi, C. S. O.	9	T1	E12	122
Waki, M.	8	T1	E13	305	Yokoi, C. S. O.	9	T1	E12	126
Walmsley, L.	9	M2	04	285	Yokoi, C. S. O.	8	M1	12	98
Walmsley, L.	9	T1	E02	275	Yonamine, T.	10	T1	E12	235
Wang, C.	9	M1	07	186	Yoshida, M.	8	T1	E12	214
Wascheck, C. C.	9	T1	E07	291	Yoshida, M.	8	T1	E03	368
Watanabe, S.	8	T1	E01	63	Yoshimura, E. M.	8	T1	E01	65
Watanabe, S.	10	T1	E03	81	Yoshimura, E. M.	8	T1	E01	67
Watanabe, S.	10	T1	E06	200	Yoshimura, E. M.	8	T1	E01	67
Watanabe, S.	10	T1	E06	200	Yoshioka, C. R. T.	10	T1	E07	265
Watanabe, S.	8	T1	E03	370	Yoshioka, C. R. T.	9	T1	E05	158
Watanabe, S.	10	T1	E06	201	Yukimitu, K.	10	T1	E03	81
Watanabe, S.	8	T1	E01	65	Yukimitu, K.	10	T1	E06	200
Watari, K.	8	T1	E13	305	Yukimitu, K.	10	T1	E06	200
Watari, K.	9	M1	02	317	Yu, M.	10	M1	02	258
Weber, G.	10	M1	13	332	Yum, K. K.	10	T1	E07	260
Weber, G.	9	T1	E13	323	Yusef, A.	10	T1	E09	140
Weberszpil, J.	8	M2	08	62	Yushmanov, V. E.	10	M1	11	297
Weid, J. P. V. D.	10	T1	E13	342	Zamar, R. C.	10	M2	11	298
Weid, J. P. V. D.	10	T1	E13	342	Zampronio, M. A.	8	T1	E06	182
Weid, J. P. V. D.	8	T1	E13	312	Zanatta, A. R.	8	T1	E03	372
Weid, J. P. V. D.	8	M1	02	240	Zanchet, D.	8	T1	E03	371
Weid, J. P. V. D.	10	T1	E07	263	Zandona, F. P.	10	M1	05	160

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Zangaro, R. A.	9	T1	E05	159	Zilio, S. C.	9	T1	E08	19
Zangaro, R. A.	10	M2	05	163	Zilio, S. C.	9	M1	01	13
Zangaro, R. A.	9	T1	E05	159	Ziman, T.	8	T1	E12	211
Zangaro, R. A.	9	M2	05	154	Zimmerman, R. L.	10	M1	05	161
Zangaro, R. A.	9	T1	E05	159	Zubov, M. F.	10	T1	E10	132
Zanotto, E. D.	10	T1	E06	199	Zubov, V.	8	M2	06	365
Zawislak, L. I.	9	M1	07	185	Zubov, V.	8	T1	E03	366
Zebende, G.	10	M2	12	130	Zubov, V. I.	10	T1	E09	139
Zeca, A.	10	M1	06	382	Zubov, V. I.	10	T1	E09	140
Zezell, D. M.	9	M2	03	47	Zubov, V. I.	10	M1	12	128
Zezell, D. M.	9	T1	E05	158	Zubov, V. I.	10	T1	E10	132
Zhang, S. Z.	9	T1	E11	116	Zubov, V. I.	10	T1	E10	132
Zhang, S. Z.	9	T1	E11	116	Zubov, V. I.	10	T1	E09	140
Zidan, M.	10	T1	E11	280	Zubov, V. I.	10	T1	E10	133
Ziemath, E. C.	10	T1	E06	199	Zubov, V. I.	10	T1	E09	140
Ziglio, F.	10	T1	E13	345	Zucolotto, V.	10	T1	E11	278
Zilio, S. C.	10	T1	E07	261	Zukerman-Schpector, J.	10	T1	E04	94
Zilio, S. C.	9	T1	E08	17	Zukerman-Schpector, J.	10	T1	E04	95
Zilio, S. C.	9	T1	E08	17	Zukerman-Schpector, J.	10	T1	E04	95
Zilio, S. C.	8	T1	E07	245	Zuriaga, M. J.	9	T1	E07	292
Zilio, S. C.	10	M2	02	258					
Zilio, S. C.	9	M2	01	14					
Zilio, S. C.	9	T1	E08	18					