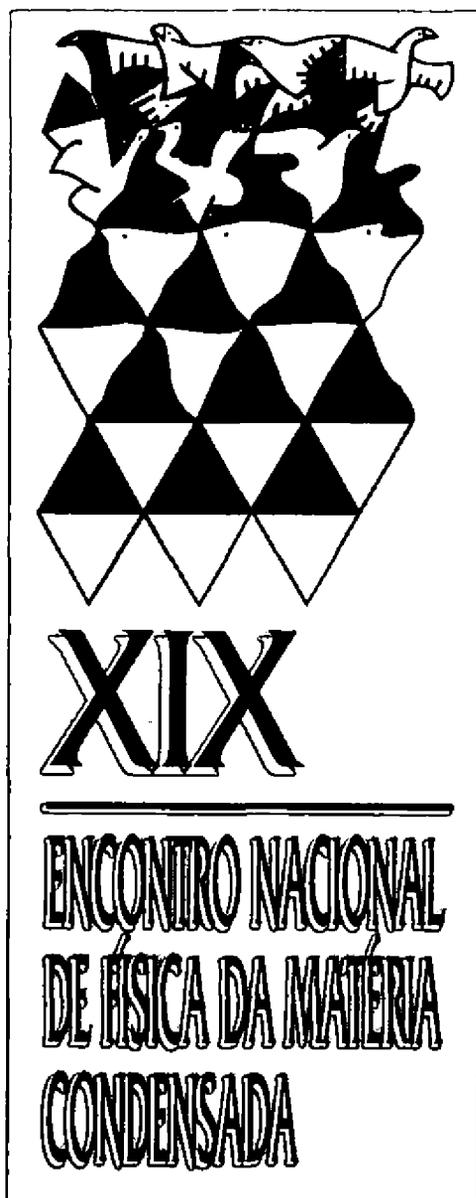


**XIX**

**ENCONTRO NACIONAL  
DE FÍSICA DA MATÉRIA  
CONDENSADA**

**R  
E  
S  
U  
M  
O  
S**

de 2 a 6 de setembro de 1996 - Hotel Monte Real - Águas de Lindóia - S.P.



de 2 a 6 de setembro de 1996

Hotel Monte Real

Águas de Lindóia - S.P.

**RESUMOS**

# **XIX ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA**

## **COMISSÃO ORGANIZADORA**

### **COORDENAÇÃO GERAL**

Spero Penha Morato (IPEN)  
(*e-mail: spero@if.usp.br*)

### **COMITÊ LOCAL**

Edson Corrêa da Silva (UNICAMP)  
Luísa Maria Scolfaro (IFUSP)  
Maria Cecília Salvadori (IFUSP)  
Nélia Ferreira Leite (INPE)  
Sônia Lícia Baldochi (IPEN)  
Suhaila Maluf Shibli (IFUSP)

### **COMITÊ REGIONAL**

Heber Ribeiro da Cruz (UFAL)  
Hélio Chacham (UFMG)  
Márcia Cristina Barbosa (UFRGS)  
Miguel Novak (UFRJ)

### **CONSULTORES**

Carlos Henrique Brito Cruz (UNICAMP)  
Márcia Fantini (IFUSP)  
Vólia Lemos Crivelenti (UNICAMP)

### **COMITÊ DE PROGRAMA**

**Coordenador:** Antônio M. Figueiredo (IFUSP)  
(*e-mail: afigueiredo@if.usp.br*)

Fernando L. A. Machado (UFPE)  
Fernando Lázaro (PUC-RJ)  
Jafferson Kamphorst (UFMG)  
João Cardoso de Lima (UFSC)  
José Wellington Tabosa (UFPE)  
José Roberto Leite (USP)  
Lia Queiroz do Amaral (USP)  
Luis Ghivelder (UFRJ)  
Marcos Tadeu T. Pacheco (UNIVAP)  
Marcos Assunção (UFMG)  
Marília Linhares Paixão (UFRJ)  
Ney V. Vugman (UFRJ)  
Oswaldo N. de Oliveira Jr. (USP-SC)  
Paulo César de Moraes (UNB)

# ÍNDICE GERAL DO LIVRO DE RESUMOS

## PALESTRAS CONVIDADAS

NMR AS A PROBE OF SPIN DENSITY WAVES IN ORGANIC METALS <i>W. Gilbert Clark</i> .....	<i>i</i>
REALIZATION OF ULTRAHIGH PERFORMANCE OPTICAL MEMORIES <i>Thomas W. Mossberg</i> .....	<i>ii</i>
SCALE INVARIANCE AND LONG-RANGE CORRELATIONS IN DYNAMICS OF COMPLEX SYSTEMS: FROM DNA AND HEARTBEAT INTERVALS TO PHYSIOLOGY AND ECONOPHYSICS <i>H. E. Stanley</i> .....	<i>iv</i>
ELECTRON PRODUCTION MECHANISMS IN HEAVY-ION ATOM COLLISIONS <i>Roberto D. Rivarola</i> .....	<i>vi</i>
CORRELATION: HOW TO MAKE COMPLEX SYSTEMS FROM SIMPLE ONES <i>Jim McGuire</i> .....	<i>vii</i>
TRANSPORT AND FIELD EMISSION PROPERTIES OF ALIGNED CARBON NANOTUBE FILMS <i>Walter A. Heer</i> .....	<i>viii</i>
HOW ELECTRONIC STRUCTURE GOT SIMPLE <i>Walter A. Harrison</i> .....	<i>ix</i>
QUANTUM RUNNELING OF MAGNETIZATION - A TASTE OF THE EXOTIC IN MAGNETISM <i>Leon Gunther</i> .....	<i>x</i>
QUASICRYSTALS AND THEIR UNUSUAL PROPERTIES <i>Orest G. Symko</i> .....	<i>xii</i>
INFLUENCE OF DEFECTS ON THE LINEAR AND NON-LINEAR PROPERTIES OF SOME OPTICAL CRYSTALS <i>G. E. Kugel</i> .....	<i>xiii</i>
METAL AND METAL ALLOY NANOSTRUCTURES WITH ATOMIC RESOLUTION <i>Host Niehus</i> .....	<i>xv</i>
BOSE-EINSTEIN CONDENSATION OF EXCITONS <i>André Mysyrowicz</i> .....	<i>xvi</i>
MATERIALS AT THE ATOMIC LEVEL <i>Gustaaf Van Tendeloo</i> .....	<i>xvii</i>

## SESSÕES

### *Biofísica*

Biofísica Molecular Teórica e Modelagem .....	1
Física Médica e Biologia Teórica .....	43
Biofísica Molecular Experimental [P].....	66
Biofísica Molecular Experimental I .....	223
Biofísica Molecular Experimental II.....	258
Instrumentação Biomédica.....	260
Biologia e Magnetismo [P] .....	281
Física Médica e Biologia [P] .....	285
Instrumentação Médica [P].....	291
Física Médica e Biologia Experimental.....	435
Sistemas Complexos .....	478
Vídeo. ....	480
Biofísica Molecular - Teoria e Modelagem [P].....	502
Redes Neurais [P].....	511
Sistemas Complexos [P] .....	518

### *Física Atômica e Molecular*

Colisão com Elétrons.....	4
Prótons e Átomos Frios. ....	45
Íons Pesados, Elétrons e Espectroscopia [P] .....	88
Astrofísica e Física Atmosférica. ....	225
Colisões Lentas. ....	226
Íons Pesados.....	262
Novos Modelos Teóricos e Estrutura Atômica e Molecular [P]. ....	296
Novos Modelos Teóricos.....	438
Espectroscopia e Aplicações.....	481
Confinamento de Átomos e Colisões Frias [P] .....	523
Dinâmica de Reações [P] .....	531

### *Física Estatística*

Sistemas Dinâmicos e Caos.....	7
Transições de Fase e Fenômenos Críticos. ....	47
Sistemas Dinâmicos e Caos [P].....	96
Simulações e Sistemas Quânticos.....	228
Transições de Fase e Fenômenos Críticos. ....	229
Transições de Fase e Fenômenos Críticos [P].....	307
Sistemas Complexos.....	441
Sistemas Complexos, Simulações e Sistemas Quânticos [P]. ....	534

### *Magnetismo e Materiais Magnéticos*

Modelos Teóricos e Cálculo de Parâmetros. ....	10
Técnicas de Caracterização.....	49
Magnetismo e Materiais Magnéticos I [P].....	109
Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas I.....	231
Filmes Finos e Multicamadas Magnéticas II. ....	264
Magnetismo e Materiais Magnéticos II [P].....	326
Materiais Magnéticos Moles.....	444
Sistemas Diluídos e Relaxação Magnética.....	483
Magnetismo e Materiais Magnéticos III [P]. ....	550

### ***Propriedades Estruturais e Dinâmicas de Materiais***

Defeitos em Cristais.....	14
Metais .....	18
Propriedades: Ótica de Cristais .....	50
Propriedades: Vidros I.....	52
Defeitos em Cristais [P].....	119
Propriedades Acústicas [P] .....	135
Propriedades Óticas de Cristais [P].....	138
Relaxação .....	235
Dielétricos .....	237
Síntese e Crescimento.....	241
Instrumentação .....	266
Defeitos em Cristais.....	268
Propriedades: Vidros II.....	271
Estrutura de Cristais [P] .....	339
Instrumentação [P] .....	345
Propriedades de Vidros [P].....	350
Transições de Fase Estruturais [P] .....	358
Propriedades Acústicas de Cristais.....	448
Transições de Fase Estruturais.....	454
Propriedades Óticas de Vidros I.....	450
Estrutura de Cristais .....	486
Propriedades Óticas de Vidros II .....	489
Metais [P].....	566
Propriedades Dietéticas [P].....	578
Relaxação [P].....	580
Síntese e Crescimento [P].....	585

### ***Semicondutores***

Crescimento e Caracterização: III-V, II-VI, SiGe. ....	21
Pontos e Fios Quânticos .....	54
Crescimento, Caracterização e Tunelamento [P] .....	142
Óptica e Magneto-Óptica.....	245
Tunelamento, Defeitos e Amorfos .....	273
Superredes, Poços, Fios e Pontos Quânticos [P].....	361
Dopagem Planar, Estrutura Eletrônica, Superfícies e Interfaces.....	456
Dispositivos.....	481
Defeitos, Superfícies e Interfaces [P] .....	590

### ***Sistemas Complexos: Polímeros e Fluidos***

Fluidos: Caracterização.....	25
Síntese e Caracterização de Polímeros I .....	29
Fluidos: Transição de Fase.....	56
Síntese e Caracterização de Polímeros II.....	58
Cristais Líquidos e Polímeros [P].....	170
Controle Molecular em Materiais Poliméricos [P] .....	175
Sistemas Complexos .....	249
Estatística de Sistemas Complexos.....	275
Aplicações Tecnológicas e RMN de Polímeros [P].....	392
Estatística de Sistemas Complexos [P].....	399
Controle Molecular em Materiais Poliméricos .....	460
Fluidos: Dinâmica I.....	463
Fluidos: Propriedades Mecânicas .....	465

Dinâmica II.....	493
Mecânica Estatística de Polímeros .....	495
Fluidos Magnéticos e Soluções [P] .....	608
Síntese e Caracterização [P] .....	614

### ***Supercondutividade***

Supercondutividade .....	32
Palestra de Revisão I. ....	60
Supercondutividade [P] .....	182
Supercondutividade II.....	251
Palestra de Revisão II. ....	276
Supercondutividade [P]. ....	410
Supercondutividade Teórica .....	467
Palestra de Revisão III.....	496

### ***Superfícies e Filmes Finos***

Propriedades Mecânicas e Revestimentos Protetores.....	35
Implantação Iônica .....	61
Física de Superfícies.[P].....	191
Filmes Finos: Diamante e Materiais Super-duros [P] .....	199
Filmes Finos: Semicondutores e Isolantes. ....	277
Superfícies: Espectroscopia I.....	470
Superfícies: Espectroscopia II.....	497
Filmes Finos: Produção e Caracterização [P] .....	622
Implantação Iônica [P].....	638

### ***Óptica***

Óptica Não-Linear e Laser.....	38
Óptica Quântica.....	40
Guias de Ondas e Fibras Ópticas.....	63
Lasers e Guias de Ondas [P] .....	208
Lasers.....	254
Espectroscopia Não-Linear em Sistemas Atômicos .....	279
Imagens, Holografia e Instrumentação [P] .....	419
Imagens e Holografia.....	474
Instrumentação Óptica .....	499
Óptica Quântica e Óptica Não Linear [P].....	644

# NMR as a Probe of Spin Density Waves in Organic Metals

W. Gilbert Clark

Department of Physics and Astronomy,  
University of California at Los Angeles,  
Box 951547, Los Angeles, CA 90095-1547, USA

The electronic ground state of several anisotropic organic metals is a pinned, incommensurate spin density wave (SDW). A gap opens in the electronic states and the sample becomes semiconducting below the transition. The electrical properties of the pinned SDW condensate are similar in many respects to those of pinned charge density wave systems: a huge dielectric constant (ca.  $10^9$ ), a depinning threshold electric field, nonlinear electrical transport from the sliding SDW, etc. Many of the static and dynamic properties of this kind of SDW are obtained by NMR measurements. The NMR spectrum and the nuclear spin-lattice relaxation rate are used to measure the order parameter and thermal fluctuations of the SDW, including critical behavior near the transition. Various aspects of the motion of the SDW driven by an electric field can be investigated through their effects on the spin echo signal. These include the restoring force of the pinning centers, the contribution of the SDW to the dielectric constant, the velocity of a sliding SDW, and the complex readjustment of the SDW phase during the repinning that occurs when the electric field is lowered below the depinning threshold. Since the corresponding spin echo signal senses only the motion of the SDW, these measurements complement electrical transport measurements, which probe together the motion of the SDW and the thermally excited normal carriers. A much more complete view of the SDW response to an electric field is obtained by carrying out both kinds of measurements on the same sample. These applications of NMR to the study of SDW's will be reviewed and new results on pinning by impurities and the dielectric constant of Bechgaard salt alloys will be presented. This work is in collaboration with M.E. Hanson, B. Alavi, S.E. Brown, G. Kriza, C. Berthier, and P. Ségransan with support from NSF Grants DMR-9319304, DMR-9412612, INT-9421019, and NATO Grant CRG-950258.

# Realization of Ultrahigh Performance Optical Memories

Thomas W. Mossberg

Department of Physics and Center for Optics in Science and Technology  
University of Oregon, Eugene, Oregon USA 97403  
Phone: 541-346-4779; Fax: 541-346-4791; email: twmoss@oregon.uoregon.edu

Optical devices have been slower to mature than those based purely on electronics. Yet optical interactions offer a number of unique capabilities expected to support entirely new classes of devices - devices offering unprecedented performance in communications, computing, and data storage applications. In the present work, optical devices based on the interaction of light with frequency-selective recording materials are discussed.

A frequency-selective recording material has the capability of supporting multiple independent recording channels. Each channel is addressed by light within a specific narrow band of optical frequencies. In some materials, operative at cryogenic temperatures, millions of distinct spectral channels are available. Through the mechanism of persistent spectral hole-burning, light can be employed to transiently or even permanently modify the absorptive or dispersive properties of the recording material within a selected channel. Such modifications provide a means of recording multiple bits of optical information within single spatial locations. Spectral multiplexing of information has clear potential in information storage systems. Less obviously, the ability to spectrally encode information provides an enabling basis for ultrahigh speed, content-controlled, all-optical switching devices operable at data speeds up to the Terabit/sec level. The development of optimal frequency-selective recording materials is vital and involves a wide range of materials physics involving for example phonon-induced broadening of optical transitions in solids, photochemistry, and inhomogeneous broadening mechanisms.

Frequency-selective memories can be addressed directly using tunable lasers or indirectly through temporal-modulation-induced spectral broadening. In the former case, bits are stored at discrete frequencies while in the latter case temporal data is stored in Fourier form and individual bits are spread over multiple spectral channels. Indirect spectral addressing may be advantageous in speed critical situations since the data rate is not limited by the spectral channel width.

Spectral memory gives rise to an important new class of storage technology, i. e. optical RAM. With numerous bits at single spatial locations it becomes possible to implement non-mechanically accessed optical memories having high data capacity, Gigabit/sec serial I/O rates, and microsecond spot-to-spot latency times. Optical RAM provides for magnetic-like storage capacities with semiconductor RAM-like speeds. Optical RAM either static or dynamic may provide an important new level in the storage hierarchy.

Spectral recording allows for the storage of frequency-dependent spatial holograms keyed to interact exclusively with specific optical bit streams. More generally, spectral holograms can be employed to reflect light of only certain temporal histories. In an optical switching

application, a number of distinct spatial-spectral gratings are written each providing for the generation of output signals in specific directions when a specific temporal sequence of optical data passes through the device. This function provides for data routing or sequence recognition. The process is all optical and can be implemented with optical data streams characterized by Mbit/sec, Gbit/sec, or even Tbit/sec bit rates.

The capabilities implicit in spatial-spectral holography in terms of optical memory and optical switching/communications are only now becoming apparent. Success of the derivative technologies will depend on enhanced understanding of the optical functionality available (the optical physics) and on materials research aimed at optimization of frequency-selective recording materials. An overview of recent developments and potential applications in the field will be presented.

# Scale Invariance and Long-Range Correlations in Dynamics of Complex Systems: from DNA and Heartbeat Intervals to Physiology and Econophysics

H. E. Stanley,<sup>1</sup> V. Afanasyev<sup>2</sup>, L. A. N. Amaral,<sup>1</sup> A.-L. Barabasi,<sup>1</sup> S. V. Buldyrev,<sup>1</sup> A. L. Goldberger,<sup>3,4</sup> S. Havlin,<sup>1,5</sup> H. Leschhorn,<sup>1</sup> P. Maass,<sup>1</sup> R. N. Mantegna,<sup>6</sup> E.J. Murphy,<sup>2</sup> C.-K. Peng,<sup>1,3</sup> P. A. Prince<sup>2</sup> M. A. Salinger,<sup>7</sup> M. H. R. Stanley,<sup>1</sup> B. Suki,<sup>4</sup>  
and G. M. Viswanathan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Center for Polymer Studies and Department of Physics, Boston University, Boston, MA 02215

<sup>2</sup>British Antarctic Survey, Natural Environment Research Council CB3 0ET, Cambridge, UK

<sup>3</sup>Cardiovascular Division, Harvard Medical School, Beth Israel Hospital, Boston, MA 02215 USA

<sup>4</sup>Department of Biomedical Engineering, Boston University, Boston, MA 02215 USA

<sup>5</sup>Minerva Center and Dept. of Physics, Bar-Ilan University, Ramat Gan, Israel

<sup>6</sup>Dipartimento di Energetica ed Applicazioni di Fisica, Palermo U., Palermo, I-90128, Italy

<sup>7</sup>School of Management, Boston University, Boston, MA 02215, USA

We discuss the basic statistical mechanical problem posed by complex systems composed of many interacting subsystems. We focus on the physics of those systems displaying non-trivial scale invariance and long-range correlations. These include (i) the “one-dimensional” sequence of base pairs in DNA [1], (ii) successive heartbeat intervals in healthy vs. diseased hearts [2], (iii) the sequence of flight times of the large seabird *Wandering Albatross* [3], and (iv) time-dependent fluctuations in the behavior of economic indicators [4,5]. The existence of anomalous fluctuations may indicate analogies in the underlying mechanisms in totally different systems which from the first glance do not have anything in common with each other [6]. In particular, we review formal analogies in the models that describe the observed scale invariance and long-range correlations, and conclude by discussing the possibility that behavior of large numbers of species with “free will” such as birds or humans might conform to analogs of the scaling laws that have proved useful in describing systems composed of large numbers of inanimate objects [7]. We emphasize not only the properties of scale invariance, but also what we learn by understanding the conditions under which scale invariance breaks down (e.g., the utility of the truncated Lévy flight [8] was recently found to be useful in interpreting a wide range of data, including the distribution of fluctuations in an economic index [4]).

## References

1. C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, R. N. Mantegna, M. Simons, and H. E. Stanley, “Statistical Properties of DNA Sequences” [PROC. INT’L IU-PAP CONF. ON STATISTICAL PHYSICS, TAIPEI], *Physica A* 221, 180–192 (1995) and references cited therein.

2. C. K. Peng, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, "Quantification of Scaling Exponents and Crossover Phenomena in Nonstationary Heartbeat Time Series," in PROC. NATO DYNAMICAL DISEASE CONFERENCE, edited by L. Glass, *Chaos* **5**, 82-87 (1995); P. Ch. Ivanov, M. G. Rosenblum, C.-K. Peng, J. Meitus, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, "Scaling and Universality in Heartbeat Dynamics," submitted.
3. G. M. Viswanathan, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, E. J. Murphy, P. A. Prince, and H. E. Stanley, "Lévy Flight Search Patterns of Wandering Albatrosses," *Nature* **381**, xxx (1996).
4. R. N. Mantegna and H. E. Stanley, "Scaling Behaviour in the Dynamics of an Economic Index," *Nature* **376**, 46-49 (1995).
5. M. H. R. Stanley, L. A. N. Amaral, S. V. Buldyrev, S. Havlin, H. Leschhorn, P. Maass, M. A. Salinger, and H. E. Stanley, "Scaling Behavior in the Growth of Companies," *Nature* **379**, 804-806 (1996).
6. A.-L. Barabási, S. V. Buldyrev, H. E. Stanley, and B. Suki, "Avalanches in the Lung: A Statistical Mechanical Approach," *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2192-2195 (1996).
7. R. N. Mantegna and H. E. Stanley, "Stock Market Dynamics and Turbulence: Parallels in Quantitative Measures of Fluctuation Phenomena," submitted.
8. R. N. Mantegna and H. E. Stanley, "Stochastic Process with Ultraslow Convergence to a Gaussian: The Truncated Lévy Flight," *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2946-2949 (1994).

# Electron Production Mechanisms in Heavy-Ion Atom Collisions

R.D. Rivarola\*, N. Stolterfoht\*\* and R. D. DuBois<sup>†</sup>

\* Instituto de Física Rosario, CONICET and Universidad Nacional de Rosario,  
2000 Rosario, Argentina

\*\* Hahn-Meitner-Institut Berlin, Bereich Festkörperphysik,  
Glienickestrasse 100, D-14109, Berlin Germany

<sup>†</sup> Pacific Northwest Laboratory, Richland WA 99352, USA

Theoretical and experimental studies of continuous electron emission in energetic ion-atom collisions are reviewed. Collisions involving incident bare ions as well as dressed projectiles are included. Ionization processes play vital roles in various fields of applied physics such as plasma physics, astrophysics, and radiation physics. Hence, understanding this basic atomic reaction has practical, as well as fundamental, importance. Fascination with this break-up event in ion-atom collisions is generated largely by the intellectual challenge of studying the dynamics of many-body problems. The motion of an electron initially bound to a target atom, liberated during a collision with a projectile ion, and finally interacting with both collision partners is a highly complex phenomenon. Since the nature of the Coulomb interaction is known, the understanding of the mechanisms relevant for ion-induced electron emission promises important insight into the many-body problem. Ejected electrons reveal information about the structure of atoms and the dynamics of collision mechanisms.

We place emphasis on the interpretation of the more relevant ionization mechanisms. These mechanisms, classified in terms of the strength of the electronic interaction with the heavy particles, are interpreted in terms of Coulomb centers associated with the projectile and target nuclear fields which strongly interact with the outgoing electron. In particular, the cases of soft collisions, binary encounter processes, electron capture to the continuum of the projectile and saddle-point electron emission are analyzed in terms of zero, one and two centers reactions. For dressed projectiles, attention is devoted to screening effects, anomalies in the binary encounter peak production and diffraction effects. Information relating to electron emission from the projectile are included. Dielectronic processes involving two active electrons are discussed in detail and a brief overview of multiple ionization reactions is presented.

# Correlation: How to Make Complex Systems from Simple Ones

Jim McGuire  
Tulane University  
New Orleans, LA 70118-5698, USA

One of the central questions of science is: how are complex things made from simple things? In many cases larger systems are more complicated than their smaller subsystems. In condensed matter, biology and chemistry the issue is how to understand large systems of atoms in terms of single atoms. In atomic physics one may strive to understand properties of many electron systems in terms of single electron properties. The general theme is interdependency of subsystems, or 'correlation'.

Correlation may be regarded as a conceptual bridge from properties of individuals to properties of groups or families. In atoms and molecules correlation occurs because electrons interact with one another - the electrons are interdependent. This electron correlation determines much of the structure and dynamics of many electron systems, i.e., how complex electronic systems are made from single electrons.

Understandably, much has been done on the correlation of static systems. There are many excellent methods and computer codes to evaluate energies and wavefunctions for complex atomic and molecular systems. However, the dynamics of these many electron systems is less well understood. The dynamics of electron correlation is a central theme of this talk.

The dynamics of electron correlation may affect single electron transitions. However, this effect is sometimes difficult to separate from other effects. Correlation is usually dominant in multiple electron transitions for fast collisions since there is not enough time for the collision partners to interact more than once. This means that multiple electron transitions in fast collisions provide an unobstructed view of the dynamics of electron correlation.

Since there are numerous processes that depend on the transition of more than a single electron, multiple electron transitions are of interest in their own right. Also recent advances in the production of highly charged ions and in synchrotron radiation provide new experimental tools for studying multiple electron transitions.

An effort has been made to include practical methods and conceptual ideas useful for analysis and interpretation of data which can be used without extensive theoretical background or large computer codes.

# Transport and Field Emission Properties of Aligned Carbon Nanotube Films

Walter A. de Heer, L. Forro, and D. Ugarte

EPFL Lausanne, Switzerland

Aligned films of carbon arc produced nanotubes have been investigated using various probes. From the transport measurements we conclude that the tubes are semi-metallic with carrier densities which resemble graphite. Anisotropies are observed in the electrical conductivity, the static susceptibility, the spin susceptibility, the g-factors, the Hall effect and the thermo powers. These anisotropies are anomalous when compared with planar graphite. The transport measurements further indicate that below about 30 K, the carriers localize. Exceptionally strong field emission is observed from these films. The current follows Fowler-Nordheim behavior and currents of  $1\text{mA}/\text{cm}^2$  at  $5\text{ V}/\mu\text{m}$  are routinely obtained, which are much greater than for diamond films under comparable conditions. This effect may be related to the unique electronic and geometrical structure of the the nanotube tips.

# How Electronic Structure Got Simple

Walter A. Harrison

Applied Physics Department

Stanford University, Stanford, CA 94305, USA

A complete calculation of the state of the many electrons and many nuclei making up a solid would not be possible. Treating the nuclei classically, placing them in a regular crystalline structure, and making a one-electron approximation reduced the problem to a lengthy computer calculation. This provided energy bands which were found to describe real solids. Once these bands were clearly understood, even the computer became unnecessary for an approximate understanding. Two quite opposite pictures proved meaningful. The electronic states in a solid could be viewed as linear combinations of valence electronic states of the constituent atoms. The only needed parameters were the electron energies in the free atom and the couplings between electron states on adjacent atoms. At the other extreme, the electrons in the solid could be treated as free particles, interacting weakly with a pseudopotential representing the effects of the atoms. The two views could only be consistent if the couplings between atomic states were to have values taken from the free-electron bands, geometrical constants times  $\frac{\hbar^2}{m \times d^2}$  with  $d$  the spacing between the atoms. Thus all parameters needed for the description of the electronic structure were obtainable from free-atom tables and the geometry of the solid. No parameters were needed from the band calculations. In fact, the calculation of electronic structure and of properties could be carried out on the back of an envelope. In addition, the calculation was no longer restricted to regular crystalline structures. The simplest cases are alkali metals, with only a single atomic s-state per atom needed. Matching with free-electron bands yields a coupling between adjacent s-states of  $V_{\sigma} = \frac{-\pi^2}{8} \frac{\hbar^2}{m \times d^2}$ . The resulting cohesion is immediate, and good to some 20%. The same parameters can be used for molecules, such as  $\text{Li}_2$ , to give the bonding energy and the shift in equilibrium spacing. For other elements, p-states are also needed, but the additional couplings are obtained in the same way. In molecules, and in semiconductors, construction of hybrid states allows the definition of independent bonds, and again an elementary theory. In typical insulators the bonds are not independent, but the effects of the coupling are small enough to be included in elementary perturbation theory. Analogous approximations are available for transition metals, where d-states become important. Just as we had no guarantee at the outset that the simplifying one-electron approximation would be adequate, we had no way to know that these two seemingly naive views of electronic structure would be meaningful. Good luck on both accounts has provided an elementary theory of this intrinsically impossible problem.

# Quantum Tunneling of Magnetization - A Taste of the Exotic in Magnetism

Leon Gunther

Department of Physics and Astronomy

Tufts University

Medford, MA 02155

There are numerous classical, thermal activation processes whereby the magnetization of a system undergoes a transition from one configuration to another by passing over an energy barrier. In the systems of interest to Quantum Tunneling of Magnetization (QTM), the relevant energy barrier is typically no more than an order of magnitude greater than the  $kT$ , where  $k$  is Boltzmann's constant and  $T$  is the temperature. Examples include: magnetic relaxation in single domain particles, nucleation of a magnetic bubble in bulk magnetic systems, and domain wall motion across energy barriers. The transition rate  $\Gamma$  for thermal activation increases exponentially with increasing temperature and with decreasing size. Most importantly,  $\Gamma$  goes to zero in the limit that the temperature goes to zero. [Concomitantly, the lifetime  $\tau = \Gamma^{-1}$  of the initial state goes to infinity.]

QTM refers to a quantum tunneling process whereby a magnetic system passes through the barrier without receiving an energy from the surroundings equal to the energy barrier. This process can take place even at absolute zero ( $T=0$ ). The term QTM is associated with systems that are macroscopic; in fact it is an example of what has generally been the stage for the preparation of spin clusters having ever increasing spin values, so that the theoretical predictions in the very large spin regime - say  $S \sim 100$  or more - can be checked.

On the theoretical side, there are interesting issues concerning the various interactions of a magnetic system that is undergoing QTM with the surrounding degrees of freedom. Examples are phonons, conduction electrons, and nuclear spins. Interactions can be dissipative and consequently typically impede QTM, or they can be supportive, as for example in resonant assisted tunneling. In addition, there is an exotic effect - at least from the standpoint of classical physics - the sensitivity of QTM to the numerical class of spin numbers: For example, quantum switching of the magnetization is not possible in a single domain (SD) particle with so-called quadratic transverse anisotropy in the absence of an applied magnetic field if the spin  $S$  is an odd half-integer. Thus, QTM would be possible if  $S=10,000$  but not if  $S=10,000 + 1/2$ . This so-called spin-parity effect can be shown to be a manifestation of Kramers' Theorem. However, there are situations where there are restrictions to  $S$  that are not so related. Other restrictions reveal themselves when the spin system is studied in the fully discrete quantum regime. Such detailed study has been forced on us by the experiments on spin cluster systems. Such restrictions and a summary of the effect of various interactions on QTM will be discussed in this talk.

We will begin by reviewing the basic theory of QTM in a SD ferromagnetic particle, the most primitive system of interest. Summary results will then be given for quantum tunneling

of domain walls and quantum nucleation of magnetic bubbles in films. The modifications for corresponding antiferromagnetic systems, for which QTM is more probable, will then be discussed. If there be time, the limitations placed by angular momentum conservation on QTM will be discussed. We will then proceed to discuss the various subjects mentioned above.

# Quasicrystals and their Unusual Properties

Orest G. Symko

Department of Physics, University of Utah,

Salt Lake City, 84112, USA

Since their discovery in 1984, quasicrystals have been the subject of many theoretical and experimental studies to probe the role of symmetry in this new class of materials. Just the fact that there can be solids with symmetries like five-fold, eight-fold, ten-fold, etc., opens up the possibility for new materials with interesting properties. Such symmetries were traditionally considered forbidden in solids as periodicity is the foundation of solid state. The first demonstration of an electron diffraction pattern from a solid with five-fold symmetry did create much excitement. Even though not periodic, a quasicrystal shows long range order as evidenced by the sharp diffraction pattern. It was difficult to accept that an aperiodic system like the quasicrystal could be ordered as much as a periodic crystal. With the discovery of thermodynamically stable quasicrystals much progress has been made toward understanding the nature and stability of this new form of solid state. The role that symmetry plays on the properties of quasicrystals is still an open question. It has been addressed especially in the behavior of electrical conductivity of quasicrystals which is many orders of magnitude less than that of each metallic constituent of the material. Furthermore the conductivity is reduced by improving the quality of the sample as well as when the temperature is lowered; this is strange as it is opposite to the behavior of the separate metallic constituent of this material. All properties, from mechanical to electrical, have unusual behavior which is attributed to the band structure and to the density of states near the Fermi energy. Many models proposed a pseudogap for explaining the behavior of mechanical and transport properties, nuclear magnetic resonance response, and heat diffusivity. Recent studies of tunneling in thin films of AlCuFe quasicrystals have shown that indeed there is a pseudogap in the density of states and that electron-electron interactions also contribute to the density of states. The measured pseudogap agrees well with theoretical calculations of the band structure in this class of materials and with the prediction of spiky variations in the density of states with gaps of the order of 0.01 eV. Unusual properties of quasicrystals, such as hardness (quasicrystals can be harder than steel), low coefficient of friction, non-stick characteristics, and electric transport, open the possibility for all sorts of novel applications of these new materials.

# Influence of Defects on the Linear and Non-Linear Properties of Some Optical Crystals

G. E. Kugel, W. Fortin and R. Klein

Laboratory MOPS- CLOES, Supelec and University of Metz,  
2, rue Edouard Belin, 57078 Metz Cedex 3, France

## 1) Introduction and general object of the study

Significant and interesting modifications in properties, such as crystalline structure and phase transition sequences and mechanisms, polar order and dielectric behaviour, pyroelectric and piezoelectric, optical linear and non-linear susceptibilities, appear in ferroelectric oxidic compounds when they are doped or mixed in solid solutions. These modifications depend on several factors such as nature and concentration of the dopants introduced, their occupation sites and their dynamics, as well as on the nature and properties of the initial compound. The present contribution consists in an investigation of three different but complementary ferroelectric systems built around oxygen octahedra skeletons and which are generally known to exhibit interesting physical properties (non-linear optical properties, photorefractivity, pyro- and piezo electricity, supraconductivity...). The main object is to clarify how and why introduction or substitution of ions modifies some specific physical properties and particularly those interesting for technological applications.

## 2) Crystalline systems investigated and dopants

The systems studied in this contribution have the common property to be ferroelectric and to contain oxygen octahedra, but with different crystalline structures or octahedra organizations.

The first system is based on the incipient perovskitic ferroelectric tantalate of potassium ( $\text{KTaO}_3$ ) hereafter called KT. The dopants introduced are Nb and Li ions, leading to the well known KTN and KTL solid solutions respectively.

The second system studied is the silver tantalate ( $\text{AgTaO}_3$ ) which itself exhibits a complicated phase diagram. The influence of doping with Nb ions is investigated for Nb content from 0 to 100%.

The last crystal studied concerns a niobate of lithium and potassium ( $\text{K}_6\text{Li}_4\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$  also called KLN) which is a tungsten-bronze type oxide potentially interesting for non-linear optical devices.

In each case, and on the basis of experimental data such as structural, dielectric, Raman, micro-wave, the specific roles of the dopants, or the relative composition in the solid solution are described and analyzed. Microscopic modelization is used in order to identify and interpret the main interactions contributing to the most relevant modifications and is turned to account for extrapolating how technologically interesting properties could be reached and optimized.

### 3. Most relevant results and analysis

In the firstly studied KT system, the comparison, versus type of dopants (Nb or Li), of the experimental dynamical properties, both of phononic and relaxational nature, and recorded on the basis of Raman and neutron spectroscopy, is exposed and analyzed as function of the respective defect concentrations. The ferroelectric soft mode temperature and dopant concentration dependences are interpreted in the framework of lattice dynamical anharmonic models. These results allow us to explain the differences appearing in the phase sequences of KTL and KTN and to show that Nb ions, contrary to Li ions, enhance strongly the non-linearity of the system. The mechanisms of the interactions involved are described and some interesting conclusions upon the origin of the non-linear electronic polarizabilities are given.

The strong high frequency relaxation, observed in the KTN crystals as an intense quasielastic light scattering, is attributed to Nb ions motions and explains the temperature dependence of the low frequency dielectric constant as well as the high electro-optic coefficients.

Furthermore, the introduction of Li ions in KT single crystals has been shown to lead to occurrence, at low temperatures, of strong photoconductive currents. These features, promising for photorefractivity, have been analyzed on the basis of an electronic band defect model taking into account the lattice distortion due to the off-centering of the Li ions.

The second system studied, the mixed silver tantalate-niobate ATN, derives from the prototype perovskite system but exhibits a complicated phase diagram as function of temperature and Nb/Ta ratio. Raman spectroscopy measurements demonstrate that, in the case of pure tantalate and low Nb content crystals, the same non-linearities than in KTN are still playing a role. Furthermore, the introduction of higher amount of Nb ions also leads to strong relaxational behaviour detected by quasielastic light diffusion and microwave spectroscopy. This feature is studied in detail in the vicinity of one particular phase transition, the temperature of which is deeply influenced by Nb concentration.

Our measurements are interpreted on the basis of dynamical modelization and point out that these relaxations can be clearly attributed to Nb ions and that they yield the main contribution to the dielectric susceptibility. Their occurrence only at extremely high frequencies (in the GHz range) and their clear dependence on both Nb content and temperature give to this system the characteristic of being perfectly adjustable in its dielectric behaviour, this in a numerical range from about 100 to 1000 and for frequencies up to about 100 GHz.

Additionally, our investigations indicate that the ATN system should be an interesting candidate for non-linear properties. Nevertheless, the problem of growing single crystals of sufficient size and of good enough optical quality is up to now not resolved.

The KLN tungsten-bronze system presents a different oxygen octahedron organization and is characterized by the fact that it crystallizes only with an excess of Nb ions. Our investigation established a connection between the non-stoichiometric ratio and structural, dielectric, ferroelectric properties as well as the indices of refraction and the non-linear susceptibilities. Using the knowledge acquired in the previous studies, we were able to understand qualitatively the main origin of the non-linearity of the KLN system. Additionally, some experiments of YAG:Nd laser second harmonic generation are given, which contain potentiality in realizing light conversion in optical waveguides.

# Metal and Metal Alloy Nanostructures with Atomic Resolution

Horst Niehus

Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik,

Oberflächenphysik & Atomstoßprozesse, Invalidenstr. 110, D10115 Berlin, Germany

Metals and ordered intermetallic compounds have many attractive properties in solid state physics and material science, like high temperature applications, nanostructured stress induced surface structures or new substrates for magnetic systems or heterogeneous catalysis. Analysis of surface structure and composition is well accomplished by a combination of e.g. high resolution imaging techniques - scanning tunneling microscopy (STM) - and mass discriminating methods as low energy ion backscattering (NICISS). The complementary character of this approach makes the element specific surface crystallography of metals and intermetallic compounds possible.

Nanostructuring by the formation of self assembled long range ordered patterns on a mesoscopic scale seems to open a way for construction of materials exposing new interesting characteristics. Patterns can occur as one dimensional stripe - or two dimensional field-like formations. Nanostructured surfaces might serve itself in the future as substrates to form e. g. regular patterned magnetic 1D or 2D arrangements. The example of formation of one dimensional striped superlattices will be discussed in detail at Cu(110)-(1x1) / Cu(110)-(2x1)- O substrates. Mesoscopic ordering of two dimensional islands have been found on oxygen induced reconstructed and also on subsequently titrated Pd(110). Namely, the Pd(110)-c(2x4)-O, Pd(110)-(1x2) and Pd(110)-(1x3)-1D surfaces form checkerboard type like patterns. A similar class of ordering seem to be absent on clean Pd(110)-(1x1). The oxygen free (1x2) and (1x3) reconstructions consist on an atomic scale of single and double rows, respectively, of Pd atoms separated by single missing rows. The c(2x4)-0 superstructure is created upon high temperature oxygen exposure. The surface reconstruction can be explained by single added rows of Pd atoms with two oxygen atoms per every other Pd atom being adsorbed in the upper layer hcp (111) sites.

Nanostructuring appears also at special ordered intermetallic compounds. The clean Cu<sub>3</sub>Au(110) surface can be prepared in two modifications, the quenched (2x1) and the relaxed (4x1) phase. On the basis of LEED and STM data a new pairing row model has been developed. Both clean surfaces, (2x1) and (4x1) phases exhibit the mixed Cu-Au surface termination with 50% Au and 50% Cu in the topmost layer. In case of the (4x1) superstructure row pairing within the top layer leads to the higher degree of surface periodicity. Similar as for the Cu and Pd samples, the origin for the formation of the Cu<sub>3</sub>Au(110)-(4x1) reconstruction can probably be found in a stress relaxation in the surface. Oxygen adsorption on the quenched (2x1) phase causes Cu segregation to the surface and an added row superstructure appears with every Cu row in the second layer being covered by -O-Cu- rows along the  $\langle 001 \rangle$  direction. Such a structure is in part similar to the added row structure obtained for Cu(110)- (2x1)-O.

# Bose-Einstein Condensation of Excitons

André Mysyrowicz  
LOA, ENSTA, École Polytechnique  
Palaiseau, France

The recent observation of Bose-Einstein Condensation (BEC) in ultracold atoms has stirred a considerable renewal of interest in this phenomenon. A gas of excitons or biexcitons in semiconductors provides another convenient system where BEC has been observed. A particularly interesting aspect of an excitonic Bose-Einstein condensate concerns its propagation properties since it can lead to a superfluid form of motion. Excitonic superfluidity corresponds to a dragfree, wavelike flow of electronic excitation energy through a crystal, reflecting the absence of exciton-phonon scattering processes.

In this conference, the experimental evidence for BEC of excitons in Cu<sub>2</sub>O will be reviewed. Particular attention will be focussed on exciton propagation at high particle densities. Exciton transport over long distances can be conveniently investigated by detecting the flux reaching the back surface of a thick sample following creation of excitons close to the front surface with a pulsed laser. An anomalous regime is observed at sufficiently low crystal temperatures, in the form of a ballistic packet progressing at a velocity close to the crystal sound velocity. The ballistic packet is attributed to a superfluid, the result of a Bose-Einstein Condensation (BEC) of excitons. Conditions for appearance of the ballistic excitonic packet are found to be in good agreement with the predictions of the dilute Bose gas model.

In a more recent series of experiments, the measurements are repeated in the presence of an additional exciton population, distributed through the sample with a tunable cw laser. A strong amplification of the excitonic packet is observed. This effect is interpreted as the radiationless stimulated emission of excitons into the packet, the excitonic counterpart of light amplification by stimulated emission of radiation (laser). It represents the first evidence, to our knowledge, of a boson (stimulated emission of massive bosons), a subject of current intensive research in ultracold atomic systems. The intimate relationship between threshold conditions for a boson and BEC will be discussed.

# Materials at the Atomic Level

Gustaaf Van Tendeloo

EMAT, University of Antwerp (RUCA)

Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

(gvt@ruca.ua.ac.be)

Solid state properties strongly depend on the crystal structure; this crystal structure can be determined by diffraction techniques (X-ray or neutron). A number of properties however are particularly determined by the defect structure or local structure of the material: e.g. the variation of the critical current in superconducting materials, optical properties in diamond, crystal growth or the conducting properties in semiconducting materials.

Electron microscopy has recently achieved the level of atomic resolution for most crystalline materials. This allows to directly visualise and analyse the local structure, together with the diffraction information. The combination with local chemical analysis from areas not larger than a few hundred atoms makes modern electron microscopy a powerful technique in experimental solid state physics. We will illustrate.

We will treat a number of examples where the knowledge of the local defect structure allows to correlate physical and structural properties. The presence of planar defects in superconducting materials strongly influences the critical temperature and an atomic analysis of these defects has led to the development of new superconducting materials. The analysis of defects in epitaxial diamond allows to deduce a growth mechanism for diamond thin films.

Atomic resolution electron microscopy also gives further insight in a number of more fundamental solid state physics problems, such as the understanding of phase transitions or the fine structure of incommensurately modulated structure. We will analyse the pre-transition effects occurring for the order-disorder transition in Ni-Mo type, the displacive transition in Ni-Al alloys and the remarkable phase transition in SiO<sub>2</sub> quartz.

## SPIN GLASS MODELS FOR SOLVENT DYNAMICS IN CHARGE-TRANSFER REACTIONS

Vitor B. P. Leite, Luis C. G. Freitas

Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

José N. Onuchic

Department of Physics, University of California at San Diego, La Jolla

*Key words:* solvent dynamics, charge-transfer, spin glass

The dynamics of solvent polarization plays a major role in the control of charge transfer reactions. The success of Marcus theory describing the solvent influence via a single collective quadratic polarization coordinate has been remarkable. Onuchic and Wolynes have proposed [1] a simple model demonstrating how a many-dimensional complex model composed by several dipole moments (representing solvent molecules or polar groups in proteins) can be reduced under the appropriate limits into the Marcus Model. The model is characterized by two parameters, an average dipole-dipole interaction as a term associated with the potential energy landscape roughness. Recently a dynamical study of the same model has been presented [2]. At high temperatures, the system exhibits effective diffusive one-dimensional dynamics, where the Born-Marcus limit is recovered. At low temperatures, a glassy phase appears with a slow non-self-averaging dynamics. At intermediate temperatures, the dynamics were discussed using the concept of *equivalent diffusion paths* and a polarization-dependent phase transition. In this work the approach used in these previous studies is extended to treat more realistic solvent models. Real solvents are discussed in terms of simple parameters described above, and an analysis of how different regimes affect the rate of charge transfer is presented. It suggests that the dynamical phase transitions can be used to address the low temperature results for alcohols which deviates dramatically from the continuum predictions [3].

[1] J.N. Onuchic, P. Wolynes; *J. Chem. Phys.*, **98**, 2218 (1993).

[2] V.B.P. Leite and J.N. Onuchic; *J. Phys. Chem.* (in press).

[3] M. Maroncelli; *J. Molec. Liq.*, **57**, 1-37 (1993).

(CNPq and NSF)

## MODELAGEM MOLECULAR CLÁSSICA USANDO O MÉTODO ESTOCÁSTICO: GENERALIZED SIMULATED ANNEALING

Marcelo Moret<sup>1,2</sup>, Pedro Pascutti<sup>3</sup>, Paulo Bisch<sup>3</sup> and Kleber Mundim<sup>1</sup>

Instituto de Física-UFBA<sup>1</sup>, Departamentode Ciências Exatas-UEFS<sup>2</sup> e Instituto de Bio-Física-UFRJ<sup>3</sup>

*Palavras-Chaves:* Otimização, Simulated Annealing, Modelagem Molecular

Propomos nesse trabalho uma estratégia estocástica para a determinação dos estados de equilíbrio de sistemas moleculares semi-clássicos, com base no método de otimização de processos Generalized Simulated Annealing (GSA). As geometrias conformacionais de equilíbrio são obtidas a partir do acoplamento entre um campo de força clássico (Código Computacional THOR) e o procedimento estocástico GSA. O método de otimização Simulated Annealing foi desenvolvido no formalismo da estatística de Boltzmann-Gibbs e tem completa analogia com a técnica de recozimento, freqüentemente usada em metalurgia para transformar o metal fundido em uma estrutura cristalina (mínimo absoluto do sistema termodinâmico). A generalização do Simulated Annealing, GSA, foi feita no formalismo da termoestatística de Tsallis. A manipulação de dois parâmetros ( $q_A$ ,  $q_V$ ) pode levar o algoritmo para o formalismo da estatística de Boltzmann-Gibbs e em especial para os algoritmos Classical Simulated Annealing (CSA), ( $q_A=1$ ,  $q_V=1$ ), e Fast Simulated Annealing (FSA), (1,2), ou para valores onde o sistema molecular seja otimizado em um menor tempo de CPU. A relação proposta, baseada na distribuição Levi-Flight, que limita a região de validade para  $q_V$ , ou melhor, o intervalo onde a convergência é alcançada mais rapidamente:

$$(4+D)/(2+D) \leq q_V \leq (2+D)/D$$

onde D é a dimensão do sistema otimizado, foi obtida pelo algoritmo desenvolvido, GSA\_ND. O algoritmo GSA\_ND se diferencia de outros baseados em GSA, pois não foram usados apelos experimentais para a construção da distribuição de visitação, a qual fornece os incrementos nas coordenadas do sistema molecular analisado. A aplicabilidade do método foi testada em diferentes sistemas moleculares, cujo número de átomos, nas moléculas, variou significativamente. Os resultados obtidos mostram que o procedimento computacional torna-se extremamente mais rápido e eficiente do que aqueles baseados na estatística de Boltzmann-Gibbs, CSA e FSA.

## MONTE CARLO SIMULATIONS OF VESICLE SELF-ORGANISATION

*Américo T. Bernardes*<sup>(a)</sup>

Institute for Theoretical Physics, Cologne University, D-50923, Köln, Germany

*Palavras Chave:* vesicles, Monte Carlo, amphiphiles

Vesicles, which are droplets of a fluid encapsulated in a membrane, represent the basic structure of almost all life forms. The amphiphilic membrane that separates different domains acts as a tunable filter, selectively allowing the passage of chemical substances. The formation of these aggregates is subject of increasing interest, both experimental and theoretically, due to the fact that they can be used as drug carrier or even as artificial cells.

An improved version of an earlier Larson-type model of solution of amphiphiles is used to simulate the spontaneous formation of vesicles. Starting with a solution of two-tailed amphiphiles either uniformly distributed or aggregated in an ordered way, self-organization into vesicles was observed by carrying out extensive Monte Carlo simulations. The aggregation of single-tailed amphiphiles and the role of the bending rigidity in the chains are also discussed.

(CNPq)

<sup>(a)</sup> Presently and permanently at Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, Campus do Morro do Cruzeiro, 34500-000 Ouro Preto/MG, Brazil  
e-mail address: atb@iceb.ufop.br

## A New Theoretical Approach to Identify Carcinogenic Activity of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons

P. M. V. B. Barone<sup>1,2</sup>, A. Camilo Jr.<sup>1,3</sup> and D.S. Galvão<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Caixa Postal 6165  
13081-970, Campinas, SP

<sup>2</sup>Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330, Juiz de Fora, MG

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos, USP, 13560-250, São Carlos, SP

*palavras-chave:* carcinogenesis, aromatic hydrocarbons, Huckel method

Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) are a class of planar molecules that can induce chemical carcinogenesis. Although there are many structural similarities among these compounds, their carcinogenic power vary in a large range, from the very strong carcinogens to the inactive ones.

Many theoretical models have been proposed to explain the PAHs carcinogenic activity, but all of them present some failures. In this work we introduce a new methodology to identify PAHs carcinogenic activity based on the concept of electronic local density of states (LDOS). We studied the electronic structure of a family of 26 PAHs which have their indices of carcinogenic power well known by means of the Huckel method.

We show that the analysis of the molecular energy levels in association with the LDOS calculated over the ring which contains the highest bond order of the molecule allows us to define very simple rules to identify whether a specific PAH molecule will present (or not) carcinogenic activity. The rules are expressed in terms of two relevant parameters: the energy difference between the Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) and the next lower level (HOMO-1) and the relative contributions of these levels to the LDOS over the ring the highest bond order of the molecule.

## **Estrutura Eletrônica das Elipticinas: Relação Estrutura-Atividade Antitumoral**

P. M. V. B. Barone<sup>1,2</sup>, S. O. Dantas.<sup>2</sup> and D.S. Galvão<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Caixa Postal 6165  
13081-970, Campinas, SP

<sup>2</sup>Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330, Juiz de Fora, MG

*palavras-chave: elipticinas, drogas antitumorais, métodos semiempíricos*

As elipticinas constituem uma família de compostos orgânicos que apresentam atividade antitumoral e citotóxica. A elipticina e alguns de seus derivados têm sido usados no tratamento quimioterápico de câncer humano, bem como em tratamentos experimentais da fase pré-AIDS em indivíduos contaminados pelo HIV.

O mecanismo de ação das elipticinas é multimodal, podendo envolver intercalação ou ligação covalente com o DNA, formação de derivados metabólicos oxidantes, e interferência na atividade catalítica da topoisomerase II ou em outros processos enzimáticos. O peso relativo de cada processo ainda não foi determinado. Neste caso, o desenvolvimento de modelos teóricos da relação estrutura-atividade destes compostos é útil tanto para indicar os parâmetros relevantes para a atividade das drogas, como para desvendar o seu mecanismo de ação.

Nós investigamos a estrutura eletrônica e o espectro de absorção de uma família de 10 elipticinas utilizando os métodos semiempíricos PM3 e ZINDO/CI, com a finalidade de modelar a sua seletividade biológica em termos de indicadores eletrônicos. Os cálculos foram realizados para as moléculas neutras e ionizadas, com geometria planar (em acordo com os dados de raios X), e repetidos sem o vínculo planar.

Os resultados mostram que o momento de dipólo e a densidade de carga em determinados sítios das moléculas variam de acordo com o grau da atividade antitumoral. Determinamos também o caráter aceitador de todas as moléculas estudadas, com ganhos energéticos de 1-1,2 eV para a captura de um elétron, e as modificações no espectro de absorção com a captura eletrônica. Outras propriedades, como a diferença em energia entre o nível mais alto ocupado e o mais baixo desocupado não são relevantes para a seletividade biológica.

## DECAIMENTO DOS ESTADOS AUTO-IONIZANTES $^{1,3}\Pi_u$ DO DIOXIDO DE CARBONO EXCITADO POR COLISÃO DE ELÉTRONS

Danilo P. Almeida

Espectrômetro de Massa por Colisão Eletrônica  
Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras chaves:* auto-ionização, dióxido de carbono, impacto de elétrons

Neste trabalho é observada a transição auto-ionizante excitada a partir do elétron 1s do carbono na molécula de CO<sub>2</sub>. Utilizou-se a técnica de espectroscopia de alta resolução por impacto de elétrons para caracterizar as transições dos estados singleto e tripleto da molécula para o primeiro estado excitado do íon molecular CO<sub>2</sub><sup>+</sup>. Onde os estados (1s)<sup>-1</sup> (2p $\pi_u$ )<sup>1,3</sup>  $\Pi_u$  foram observados via seu decaimento por ejeção eletrônica em função da energia incidente.

Ficou caracterizado o deslocamento das energias dos elétrons ejetados. O que foi interpretado como sendo o efeito da interação pós-colisão (PCI) entre os elétrons incidente e emitido.

São também apresentados a razão entre as seções de choque para a formação do estado iônico CO<sub>2</sub><sup>+</sup> ( $A^2\Pi_u$ ), populadas por ambos os mecanismos estudados bem como a diferença de energia dos níveis singleto e tripleto mencionados.

Referência:

D.P. Almeida, G. Dawber e G.C. King, Chem. Phys. Lett. 233 (1995) 1.

Apoio CNPq e Shuster Laboratory, Manchester University.

## PREDISSOCIAÇÃO DA MOLÉCULA DE NITROGÊNIO INDUZIDA POR ELÉTRONS RÁPIDOS E FÓTONS

I. Borges Jr.<sup>1</sup>, Ginette Jalbert<sup>1</sup> e C. E. Bielschowsky<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Instituto de Física - UFRJ, <sup>2</sup>Instituto de Química - UFRJ

*Palavras chave:* colisão, moléculas diatômicas, predissociação.

A predissociação de moléculas diatômicas por elétrons rápidos ou fótons produzindo átomos neutro(s) e/ou excitado(s) é um importante processo de fragmentação molecular. Este processo se manifesta pela decomposição da molécula quando ela é excitada para um estado que é quase ligado com respeito ao contínuo dissociativo dos átomos separados. Os poucos resultados experimentais existentes de seções de choque da predissociação do nitrogênio apresentam discrepâncias entre si. Do ponto de vista teórico existem apenas resultados descrevendo parte do processo.

A predissociação é descrita teoricamente segundo a teoria de Fano e o processo de excitação ao estado predissociado através da primeira aproximação de Born. As curvas de energia potencial da molécula são calculadas em nível de interação de configurações, o que permite levar em conta efeitos de relaxação e de correlação eletrônica para os estados eletrônicos envolvidos no processo. Estão sendo investigados os possíveis estados predissociados  $b^1S_u^+$ ,  $c^1S_u^+$ ,  $a^1P_u$ ,  $b^1P_u$  e  $o^1P_u$ .

Foram obtidas curvas de energia potencial para o estado fundamental assim como para os estados eletrônicos excitados em nível de interação de configurações. A energia do estado fundamental obtida em nível CI incluindo os orbitais virtuais melhorados (IVOS) foi de -108,9923 u.a. para a distância internuclear de equilíbrio.

Foram calculadas as forças de oscilador generalizado (FOG) e forças de oscilador ótico (FOO) da excitação do estado fundamental aos estados predissociados como função da distância internuclear R. Estes resultados, além de fazerem parte do cálculo da seção de choque de predissociação, são utilizados para fazer uma estimativa preliminar da predissociação, vista com uma competição entre o decaimento do estado predissociado para o estado fundamental, com emissão de um fóton (processo radiativo), e a predissociação em si (processo não radiativo).

## ESPALHAMENTO SUPERELÁSTICO DE ELÉTRONS POR H<sub>2</sub>

Cláudio S. Sartori<sup>(\*)</sup>, Fernando J. da Paixão e Marco A. P. Lima  
Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp, 13083-970 Campinas - SP  
<sup>(\*)</sup> Endereço permanente: Universidade Paulista - Unip Campinas - SP

*Palavras-Chave:* Espalhamento, excitações eletrônicas, polarização de spin.

Utilizamos o Método Multicanal de Schwinger para um cálculo das seções de choque dos processos envolvendo 5 estados da molécula de H<sub>2</sub> ( $X^1\Sigma_g^+$ ,  $b^3\Sigma_u^+$ ,  $a^3\Sigma_g^+$ ,  $c^3\Pi_u$ ). A ênfase do trabalho está nas transições envolvendo estados excitados:  $a^3\Sigma_g^+ \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ ;  $a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$  e  $a^3\Sigma_g^+ \rightarrow c^3\Pi_u$ . Calculamos as seções de choque de spin-flip entre estados tripletos, para analisar o papel do potencial de troca. Apesar da importância do processo de colisão de elétrons com moléculas excitadas para ciência básica e aplicada (modelagem de plasmas frios, de atmosferas planetárias e de lasers moleculares), nos parece que este é o primeiro estudo teórico no assunto. Nossos resultados mostram: (1) Os valores de seção de choque entre estados excitados da molécula de H<sub>2</sub> são ordens de grandeza maiores que os correspondentes envolvendo o estado fundamental. Nas transições entre estados excitados a diferença de energia entre eles é muito menor que quando um dos estados é o fundamental. Por isto, a fração de elétrons que pode produzir excitações é muito maior. A combinação destes dois efeitos permite que uma pequena fração de moléculas excitadas produza grandes efeitos nas propriedades do meio. (2) O efeito de troca para (de)excitação é maior que nos processos envolvendo o estado fundamental.

(Cnpq, Finep, Fapesp)

## EXCITAÇÃO ELETRÔNICA DE MOLÉCULAS POR IMPACTO DE ELÉTRONS UTILIZANDO PSEUDOPOTENCIAIS "NORM-CONSERVING"

Alexandra P. P. Natalense, Cláudio S. Sartori, Márcio H. F. Bettega\*

Luiz G. Ferreira, e Marco A. P. Lima

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas,  
UNICAMP 13083-970 Campinas, São Paulo

\* Dep<sup>to</sup> de Física da Universidade Federal do Paraná,  
81531-970 Curitiba, Paraná

*Palavras-chave:* espalhamento de elétrons, excitações eletrônicas, pseudopotenciais.

Neste trabalho, mostramos seções de choque de excitação eletrônica por impacto de elétrons para os quatro primeiros estados excitados tripletos da molécula de H<sub>2</sub> ( $b^3\Sigma_u^+$ ,  $a^3\Sigma_g^+$ ,  $c^3\Pi_u$ , and  $d^3\Pi_u$ ), utilizando o Método Multicanal de Schwinger com pseudopotenciais (SMCPP). A idéia básica do método SMCPP é substituir o núcleo e os elétrons de caroço de cada átomo da molécula por um pseudopotencial suave e "norm-conserving" e descrever os elétrons de valência dentro da aproximação Hartree-Fock. O método já foi aplicado com sucesso a estudos de espalhamento inelástico de elétrons por outras moléculas (CH<sub>2</sub>O e Na<sub>2</sub>). Nesta aplicação, como o átomo de hidrogênio não tem elétrons de caroço, estudamos o efeito de se substituir o potencial  $1/r$  por um pseudopotencial suave (finito na origem), sobre as seções de choque de excitação eletrônica de H<sub>2</sub>. Os resultados mostram que os pseudopotenciais utilizados na descrição do alvo molecular, apesar de muito diferentes do potencial real, não alteram as seções de choque de excitação eletrônica. (FAPESP, CNPq, FINEP)

## PARÂMETROS DE ESPALHAMENTO, EM SEGUNDA APROXIMAÇÃO DE BORN, PARA A TRANSIÇÃO $(2p)^3(^1S_0) \rightarrow 3s \left[ \frac{1}{2} \right]^0 (^1P_1)$ DO ÁTOMO DE NEÔNIO

*Irineu Luiz de Carvalho*

Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade de Brasília

*Palavras-Chave:* espalhamento, Born, neônio

Sabemos que a aplicação da aproximação de Born em primeira ordem (PAB), ao estudo de colisões de elétrons por átomos, fornece resultados satisfatórios apenas para poucos parâmetros de espalhamento. Mesmo nestes casos, as partículas incidentes devem possuir altas energias e não experimentarem grandes deflexões angulares. Na faixa intermediária de energias (50 - 500 eV), a aproximação de Born em segunda ordem (SAB) tem se revelado eficiente no cálculo de alguns parâmetros de espalhamento. Neste trabalho, usamos uma forma simplificada da SAB no cálculo de seções de choque diferenciais e de diversos parâmetros de correlação angular elétron-fóton, referentes à transição do átomo de neônio citada acima. No cálculo do termo de segunda ordem, substituímos as amplitudes de Born exatas pelas correspondentes representações analíticas devidas a Csanak e Taylor [Phys. Rev. A6, 1843 (1972)] e eliminamos o somatório sobre todos os estados intermediários usando uma relação de fechamento. Cerca de setenta por cento das integrais foram obtidas analiticamente e as demais calculadas numericamente. Selecionamos energias (do elétron incidente) de 80, 100, 120, 200 e 500 eV. Nossas seções de choque diferenciais estão em satisfatória concordância com dados experimentais e resultados teóricos fornecidos por técnicas baseadas em ondas distorcidas. Quanto aos parâmetros de correlação angular, a escassez de dados disponíveis para comparação não recomenda uma conclusão segura a respeito da eficiência do método empregado. Entretanto, os presentes resultados e outros que obtivemos anteriormente, nos levam a crer que a SAB é incapaz de fornecer resultados precisos para a maioria dos parâmetros de correlação angular elétron-fóton - embora represente considerável avanço em relação a PAB.

## EMIÇÃO DE ELÉTRONS EM COLISÕES BINÁRIAS SIMPLES

*Flávia S. Jorás, G.M. Sigaud, E.C. Montenegro, M.M. Sant'Anna, A.C.F. dos Santos*  
Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - RJ

*W.S. Melo*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*M. Kuzel, K.O. Groeneveld*

Institut für Kernphysik, J.W. Goethe Universität, Frankfurt/Main, Alemanha

*Palavras-Chave:* colisões, elétrons, encontro binário

Nos espectros duplamente diferenciais de velocidade dos elétrons emitidos em colisões atômicas, uma das estruturas que se pode ver é o pico de Encontro Binário (PEB), que tem origem em colisões elásticas entre o projétil incidente e os elétrons do alvo. Resultados experimentais para sistemas com  $Z_p > Z_A$ , onde  $Z_p$  e  $Z_A$  são os números atômicos do projétil e do alvo, respectivamente, indicam que há um desvio  $\Delta E$  entre os valores medidos para a energia do máximo do PEB e um tratamento clássico simples para colisões binárias. Aproximações melhores seriam aquelas que consideram o espalhamento do elétron nos potenciais do projétil e residual do alvo. Com o objetivo de estudar o comportamento do PEB em função de  $Z_A$  para sistemas com  $Z_p \leq Z_A$ , foram medidos os espectros dos elétrons emitidos a  $0^\circ$  em colisões de  $\text{He}^+$ , com energia de 2,0 MeV, incidindo sobre alvos de He, Ne, Ar,  $\text{N}_2$  e  $\text{O}_2$ , usando-se o Acelerador Van de Graaff da PUC-Rio. Os elétrons emitidos foram analisados por meio de um espectrômetro eletrostático de placas paralelas construído no Laboratório. Observou-se uma dependência de  $\Delta E$  e da largura do PEB com  $Z_A$ , o que indica que efeitos de dois centros devem ser considerados no estudo da emissão de elétrons em colisões binárias. (CNPq, FAPERJ, FINEP, Volkswagen Stiftung).

## TURBULÊNCIA BI-DIMENSIONAL EM PLASMA ELETRÔNICO: DESCRIÇÃO TERMOESTATÍSTICA NÃO EXTENSIVA.

*Celia Anteneodo, Constantino Tsallis*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ

*Palavras-Chave:* turbulência, estatística generalizada, não extensividade

Huang e Driscoll[1] produziram um estado quasi-estacionário (metaequilíbrio) turbulento em plasma eletrônico puro confinado no interior de um cilindro metálico oco (de raio  $r_w$ ) na presença de um campo magnético externo axial. Eles mediram a densidade eletrônica  $n(r)$  radial neste estado, e ela apresenta praticamente simetria axial. Calcularam ainda, num modelo de vórtices pontuais, a densidade teórica predita no quadro da estatística de Boltzmann-Gibbs (maximização da entropia  $-\int d^2r n(r) \ln n(r)$ , a energia e momento angular fixos), e mostraram que ela discorda sensivelmente do resultado experimental. Após mais duas tentativas sem sucesso, calcularam a densidade sob duas hipóteses heurísticas: (i) minimização da enstrofia  $\int d^2r [n(r)]^2$ ; (ii) aplicação de um corte (cut-off) para todo valor de  $r \geq r_c$  ( $r_c < r_w$ ), onde  $n(r_c) = 0$ . Esta teoria (Restricted Minimum Enstrophy; RME) apresenta concordância satisfatória com os dados experimentais. Recentemente, Boghosian[2] provou que a teoria RME equivale precisamente a maximizar, para  $q=1/2$ ,  $S_q \equiv (1 - \int d^2r [n(r)]^q)/(q-1)$  no quadro da termoestatística não extensiva introduzida em 1988 por um de nós[3], estatística esta já aplicada com sucesso em sistemas físicos tais como a difusão anômala[4] e neutrinos solares[5], e cuja teoria da resposta linear acaba de ser formulada[6]. Ambas hipóteses (i) e (ii) supracitadas emergem naturalmente no quadro deste formalismo generalizado que, para  $q=1$ , reproduz a estatística de BG. No presente trabalho exploramos a teoria de Boghosian para  $0 \leq q \leq 1$ . Mostramos que, para  $r \rightarrow r_c$ ,  $n(r) \propto (r_c - r)^{q/(1-q)}$ . Consequentemente,  $n'(r_c)$  é nula, finita ou infinita para  $q > 1/2$ ,  $q = 1/2$  e  $q < 1/2$  respectivamente. Os dados experimentais excluem  $q=1$  e são compatíveis com  $q \geq 1/2$  (não necessariamente  $q=1/2$ ).

[1] X.-P. Huang & C.F. Driscoll, Phys. Rev. Lett. 72, 2187(1994). [2] B.M. Boghosian, Phys. Rev. E 53(1996), in press.

[3] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52, 479 (1988); E.M.F. Curado & C. Tsallis, J. Phys. A 24, L69 (1991).

[4] D.H. Zanette & P.A. Alemany, Phys. Rev. Lett. 75, 366 (1995); C. Tsallis, et al., Phys. Rev. Lett. 75, 3589 (1995).

[5] G. Kaniadakis et al., Phys. Lett. B 369, 308 (1996). [6] A.K. Rajagopal, Phys. Rev. Lett. 76 (1996), in press.

## Roundoff-induced Coalescence of Chaotic Trajectories and Control of Synchronization

*Lech Longa<sup>\*</sup>, Evaldo M. F. Curado<sup>§,†</sup> and Fernando A. Oliveira<sup>‡</sup>*

<sup>\*</sup> Department of Statistical Physics, Jagellonian University, Kraków, Poland

<sup>§</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro

<sup>‡</sup> Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UnB

*Key words:* Chaos, non-linearity, noise

We show that the coalescence of a pair of chaotic systems (chaotic region of logistic maps) linked by a common noise term (Phys. Rev. Lett. 72, 1451 (1994)) is a roundoff-induced effect connected with finite accuracy of numerical simulations. The average coalescence time follows the exponential law  $e^{A+B/N}$  where  $N$  is the precision of the calculation and  $A, B$  are universal functions of the map and the noise strength, but independent of  $N$  (the calculations were performed with a fixed number,  $N$ , of digits). This shows that there is no synchronisation of the systems if iterations are done with *infinite* precisions. We also show that the use of the noise in an adequate way (driving the noise only to the contracting region of the map) allows us to get the synchronisation of the orbits in a number of iterations lower than a chosen - arbitrary - number. Some general conditions for this control of coalescence are established. The Lyapunov exponents were calculated and we verify they present behaviours that are contradictories with the expected ones for chaos in random systems. They were studied for the whole phase space in function of the strength of the noise and for the contracting regions in function of their sizes. For the first case the Lyapunov exponent crosses the axis, from positive to negative values, at  $w$  (strength) = 0.45. For the second case the Lyapunov exponent is always negative but reaches zero at  $\delta$  (linear dimension of the contracting area) = 0.68. This point separates two regions, one where the distance between two points does not coalesce and other where the coalescence occurs.

## IMMUNE NETWORK AND IMMUNE MEMORY MODELLED BY A CELLULAR AUTOMATA

*Américo T. Bernardes<sup>(†,\*)</sup> & Rita M. Zorzenon dos Santos<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup>Institute for Theoretical Physics, Cologne University, D-50923, Köln, Germany

<sup>‡</sup>Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Av. Litorânea, s/n - Praia Vermelha, C. P. 100296, 24210-340 Niterói-RJ-Brazil

*Palavras Chave:* immune system, cellular automata, spread of damage

In the seventies Jerne proposed a new theory to explain the basis of the immune system behaviour. He suggested the existence of a functional connected network, in which the interactions are based on pattern recognition of the idiotypes carried by the lymphocytes. The lymphocytes that belong to this network vary for each individual. Using a simple cellular automata to model the immune repertoire we show that despite the stable and chaotic regimes attained by the automata are not very interesting from the biological point of view, the transition region exhibits the necessary complexity to describe the immune repertoire dynamics and the immune network proposed by Jerne. In this region, we have obtained a functional connected network involving  $\sim 10\%$  of the lymphocytes available in the repertoire, embedded in a sea of disconnected ones, in a good agreement with the conjectures of Jerne and others. Moreover, the model reproduces the fact that each immune system has its own signature. We also show that this model reproduces, in the transition region, the immune memory as a consequence of the dynamics of the system.

(CNPq)

<sup>(\*)</sup> Presently and permanently at Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, Campus do Morro do Cruzeiro, 34500-000 Ouro Preto/MG, Brazil

## TEORIA DE TAXA DE REAÇÕES PARA CADEIAS LONGAS

*Fernando Albuquerque de Oliveira*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

*Palavras-chave:* taxa de reação, fratura

Nós desenvolvemos uma teoria para a taxa de quebra de cadeias longas. Cada resultado da teoria é testado via simulação<sup>1</sup>, onde conjuntos de 800 cadeias são submetidas a uma tensão externa. O objetivo é obter uma expressão para a taxa de reação de fraturas das cadeias em função da temperatura, tensão, comprimento da cadeia e fricção entre as cadeias. Nós resolvemos numericamente um conjunto de equações de Langevin, onde as interações entre as partículas de uma mesma cadeia são dadas por potenciais tipo do Lennard-Jones, e as interações entre as cadeias são dadas por uma fricção instantânea e um ruído. Nós seguimos a evolução de uma ligação até que um processo irreversível de quebra acontece. Observamos que o processo de quebra ocorre em apenas um ponto de cadeia, o que nos permite criar um potencial efetivo (variacionalmente exato) para a fratura. Deste modo, é possível descrever o processo de quebra como uma transição de uma partícula de um mínimo metal-estável para um mínimo global. Nesta descrição, o efeito de correlação na interação com as partículas vizinhas e tal que a fricção instantânea é transformada em memória<sup>2</sup>. O resultado principal é obtermos uma expressão analítica do tempo característico de quebra (inverso da taxa de reação) que é basicamente um prefactor vezes uma taxa de Arrhenius. Nós generalizamos a teoria de uma partícula de *Polach et al*<sup>3</sup> para incluir a dinâmica da cadeia<sup>4</sup>.

1. F. A. Oliveira and P. L. Taylor. *J. Chem. Phys.* 101, (1994) 10118.
2. F. A. Oliveira. *Phys. Rev. B* 52 (1995) 31.
3. Eli Polach, S.Tucher and B. J. Berne. *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 1395.
4. F. A. Oliveira. Palestra Convidada no "Workshop Materials Instability under Mechanical Loading". São Petesburgo, Russia (junho - 1996). A ser publicado no *Journal of Technical Physics*.

## VORTEX NORMAL MODES IN 2D EASY-PLANE FERROMAGNETS AND ANTIFERROMAGNETS

*G. M. Wysin*

Department of Physics, Kansas State University, Manhattan, KS 66506 U.S.A.

*A. R. Völkel*

University of Toronto, Toronto, Ontario, Canada, M5S 1A7

*palavras-chave: magnets, vortices, spinwaves.*

The spinwave modes associated with magnetic vortices in classical two-dimensional easy-plane ferromagnets (FM) and antiferromagnets (AFM) are studied numerically and compared. We determine the modes about a static vortex through numerical diagonalization on circular systems containing up to several hundred spins on a square lattice, as a function of the anisotropy parameter,  $\lambda = J_x/J_{xy}$ , where  $J_x$  and  $J_{xy}$  are the near-neighbor exchange couplings of the indicated spin components. In the FM system, a quasilocal mode is associated with the instability of vortices to transform between in-plane and out-of-plane types at a critical anisotropy  $\lambda_c < 1$ . In the AFM system, the corresponding instability mode is a true local mode for the out-of-plane vortex. Both systems have degenerate pairs of modes for  $\lambda < \lambda_c$ , however, these degeneracies split for  $\lambda > \lambda_c$  in the FM system but not in the AFM system. We relate this to the presence of a gyrovectore for the FM out-of-plane vortex, and corresponding orbital motions associated with the translation modes, both of which are absent for the AFM out-of-plane vortices.

Supported by The National Science Foundation through grant DMR-9412300.

## FERROMAGNETO DE ISING COM INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE : PROPAGAÇÃO DE DANO COM DINÂMICA DE GLAUBER

*Uriel M. S. Costa e Constantino Tsallis*

Universidade Federal de Alagoas e Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

*Palavras-Chaves : Modelo de Ising, Longo alcance, Propagação de dano.*

Estudamos, para a cadeia linear ( $d=1$ ) e a rede quadrada ( $d=2$ ), o ferromagneto de Ising caracterizado pelo Hamiltoniano  $H = -J \sum_{i,j} [1/r_{ij}^\alpha] S_i S_j$  ( $J > 0$ ;  $S_i = \pm 1$ ;  $r_{ij} \equiv$  distância  $\geq 1$ ) onde  $0 \leq \alpha \leq \infty$ ;  $\alpha = \infty$  corresponde ao limite de interação entre primeiros vizinhos somente, e  $\alpha = 0$  corresponde ao limite do campo molecular, no qual todos os spins interagem dois a dois com igual intensidade. É conhecido que a temperatura crítica  $k_B T_c / J$  cresce quando  $\alpha$  decresce de  $\alpha = \infty$  a  $\alpha = d$ , e diverge para  $0 \leq \alpha \leq d$ . Mais especificamente calculamos, a traves de simulações computacionais em redes de  $N$  spins com condições periódicas, a dependencia térmica do dano  $\psi$  associado a dinâmica de Glauber para  $0 \leq \alpha \leq \infty$ . Exibimos a escala correta com  $N$  quando  $\alpha \leq d$ . Em particular, verificamos que  $k_B T_c / J N^*$  (com  $N^* = N^{1-\alpha/d} / (1-\alpha/d)$ ) é finita para todo  $\alpha \in [0, \infty]$ . A particular expressão para  $N^*$  acima apresentada e sugerida pela termoestatística não extensiva proposta em 1988 por um de nós [1], estatística esta que tem recebido aplicações físicas para a difusão anômala [2], a turbulência em experimentos de plasma eletrônico [3], o problema dos neutrinos solares [4], e cuja teoria da resposta linear acaba de ser formulada [5].

[1] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52, 479 (1988); E.M.F. Curado and C. Tsallis, J. Phys. A 24, L69 (1991);

[2] C. Tsallis, S.V.F. Levy, A.M.C. Souza and R. Maynard, Phys. Rev. Lett. 75, 3589 (1995).

[3] B.M. Boghosian, (vit Thermodynamic description of the relaxation of two-dimensional turbulence using Tsallis statistics), Phys. Rev. E 53 (March/April 1996), in press.

[4] G. Kaniadakis, A. Lavagno and P. Quarati, Phys. Lett. B 369, 308 (1996).

[5] A.K. Rajagopal, (vit Dynamic linear response theory for a nonextensive system based on the Tsallis prescription), Phys. Rev. Lett. 76 (1996), in press.

## REMARKS IN THE METAL-INSULATOR TRANSITION: A TWO-BAND MODEL.

M. V. Tovar Costa<sup>1</sup>, N. A. de Oliveira<sup>2</sup>, G. M. Japiassú<sup>3</sup> and A. Troper<sup>1, 2</sup>

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

Rua São Francisco Xavier, 524, 20550-013, Rio de Janeiro

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Caixa Postal 68528, Rio de Janeiro, 21945-970, RJ, Brazil

**Key Words:** metal-nonmetal transition, Hubbard I approach, Kondo insulators

Within a two-band model, we discuss some problems related to the metal-nonmetal transition<sup>1</sup>. Considering the bands as being strongly hybridized and correlated, and dealing with the Coulomb interactions in the Hubbard I approach, we find that a hybridized gap appears above a critical value of the effective mixing term which depends on the repulsive interband Falicov-Kimball-like interaction and the ratio between the effective masses of the large and the narrow bands. The Coulomb correlation in the narrow band is treated, for simplicity, in the limit of  $U \rightarrow \infty$ . We focus our study on the pressure induced metal-nonmetal transition and in Kondo insulator systems<sup>2</sup>. Comparison of our theoretical results and some available experimental data are presented.

<sup>1</sup> P. Wachter, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth, vol.19 - Lanthanides/Actinides: Physics - II edited by K. A. Gschneider, Jr., Eyring, G. H. Lander and G. R. Choppin, 1994, Elsevier Science B. V. .

<sup>2</sup> M. A. Continentino, G. M. Japiassú and A. Troper, Phys. Rev. B49, 4432 (1994); *ibid.* to be published in J. Appl. Phys. - April (1996).

## ASSIMETRIA PARTÍCULA-BURACO NO MODELO KONDO DE DUAS IMPUREZAS

W. L. C. Lima<sup>1,2</sup>, J. B. Silva<sup>1,3</sup>, W. C. Oliveira<sup>1,4</sup>, J. L. N. Mello<sup>1,5</sup>, L. N. Oliveira<sup>1</sup> e J. W. Wilkins<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos, USP - SP, <sup>2</sup>Universidade do Tocantins, Gurupi -TO,

<sup>3</sup>Instituto de Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa - PR, <sup>4</sup>Universidade Federal

Fluminense, Niterói-RJ, <sup>5</sup>Instituto de Ciências exatas, Universidade do Amazonas,

Manaus - AM, <sup>6</sup>Physics Department, The Ohio State University, Columbus-OH, USA

**Palavras chave:** Kondo, férmions pesados, susceptibilidade

No modelo Kondo de duas impurezas há competição entre a energia de Kondo ( $k_B T_K$ ) e a interação RKKY (I). A susceptibilidade magnética ( $\chi$ ) das impurezas em função da temperatura, calculada em 1981 pela técnica de *scaling* perturbativo, mostrou que, para interações ferromagnéticas (FM) fortes ocorre um efeito Kondo de dois estágios e para interação antiferromagnética (AFM) há uma transição contínua de um regime Kondo ( $k_B T_K \gg I$ ) para um regime RKKY ( $k_B T_K \ll I$ ). Trabalhos posteriores, aplicando a técnica de grupo de renormalização numérico (GRN) tradicional a um modelo simétrico, isto é, invariante sob transformação partícula-buraco, encontraram um comportamento de líquido não-de-Fermi, para um valor crítico de  $I/k_B T_K$ , separando o regime Kondo do RKKY AFM. Neste trabalho, desenvolvemos uma técnica do GRN que diagonaliza o modelo convencional de Kondo de duas impurezas preservando a sua assimetria partícula-buraco. Apresentamos o primeiro cálculo essencialmente exato de  $\chi(T)$ , que confirma o quadro descrito pelo *scaling* perturbativo. No caso AFM a susceptibilidade a baixas temperaturas é dominada por contribuições tipo Van-Vleck, originadas das excitações virtuais singleto-triplete. Encontramos uma linha de pontos fixos com comportamento de líquido de Fermi e propriedades que variam continuamente em função de  $I/k_B T_K$ . Para  $T=0$  a susceptibilidade e o coeficiente do calor específico ( $\gamma$ ) são descritos por curvas universais parametrizadas pela largura da banda de condução ( $D$ ). No limite  $D \rightarrow 0$ , o modelo tende a ser simétrico, e  $\gamma$  diverge, emergindo comportamento crítico para  $I/k_B T_K \approx 2$ .

(CAPES, CNPQ, FAPESP)

## FUNCTIONAL INTEGRAL TREATMENT OF THE ANDERSON MODEL

*João Florencio*

Departamento de Física, ICEX, UFMG

*Palavras-chave:* Anderson model, functional integral, semiclassical approximation

A functional integral method is used to obtain the partition function of the Anderson model. In that model, a system of band electrons interact with electrons from a local level. A local electron of, say, spin up can become a conduction electron of spin up due to hybridization. Then an electron of spin down from the conduction band can move into the local level. Hence, it appears that the spin of the local level has flipped, as in the Kondo model. However, the Anderson model exhibits a richer behavior, since the conduction electrons can undergo exchange with the local electrons, among other things. In the Kondo model, on the other hand, the local level contains only a single spin whose only role is to flip instantaneously upon interacting with the conduction electrons. In the present work, the density matrix is cast as a functional integral, where the integration variables are Grassmann numbers and the integration paths obey one-sided boundary conditions at either 0 or  $\beta = 1/kT$ . The trace formula is then used to obtain the partition function. The band variables are integrated out, leaving a non-Gaussian integral for the local electrons. That integral is calculated in infinite-order of a semiclassical expansion about paths in which all contributions of the hybridization matrix elements are kept up to  $\mathcal{O}(V_k^2)$ . All the contributions to the partition function in that order are properly taken into account, as opposed to some calculations found in the literature [e.g., Keiter and Morandi, 1984]. The results obtained are valid for *all* intra-site Coulomb energy  $U$ , band energies  $\epsilon_{k,\sigma}$ , and local energy levels  $\epsilon_\sigma$ . The inclusion of all the contributions to second order in the hybridization removes the spurious divergences that are present in other works.

## TIGHT-BINDING TREATMENT OF THE HUBBARD MODEL AT HIGH DIMENSIONS

*L. Craco and M. A. Gusmão*

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

*Palavras-Chave:* Hubbard, exact, perturbation

The exact mean-field equations for the Hubbard model when the number of spatial dimensions goes to infinity<sup>1</sup> are reobtained by means of a perturbation expansion of the one-particle Green's function around the atomic limit. The structure of the diagrammatic representation of the perturbation series is greatly simplified in this limit, allowing a formal resummation that verifies the reduction to a single-site effective problem. Furthermore, the method provides a natural way of addressing this effective problem by a perturbative expansion in the local mean-field. In the case of the simplified Hubbard (Falicov-Kimball) model these equations can be completely solved to give the exact local Green's function  $G_{ii}(i\omega_n)$ , reproducing a previous solution obtained by Brandt and Mielsch<sup>2</sup>. We use this solution as a starting point for the study of the complete Hubbard model, constructing approximate solutions by adding corrections to the Green's function of the Falicov-Kimball model. These corrections are obtained selecting different diagrammatic structures deriving from the application of a generalized Wick's theorem. We compare the results of these approximated solutions with those obtained by other methods.

1. A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).
2. U. Brandt and C. Mielsch, Z. Phys. B **75**, 365 (1989).

## ELECTRONIC CORRELATIONS IN SUPERLATTICES

T. C. de L. Paiva, J. J. Rodríguez-Núñez, J. d'Albuquerque e Castro, e R. R. dos Santos.

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

*Palavras-Chave:* Multicamadas; magnetismo; supercondutividade.

We discuss the role of electronic correlations in both superconducting and magnetic superlattices. A simple model is considered, in which the on-site coupling (the so-called Hubbard- $U$  term) is site-dependent, but periodic.

The magnetic superlattice is represented by a repeated pattern of repulsive (i.e., positive  $U$ ) and free (i.e.,  $U = 0$ ) sites. In one dimension this system behaves dramatically different from the otherwise homogeneous system: when a weak form of frustration is present, Spin-Density-Wave (SDW) correlations at half-filling are wiped out; on the other hand, SDW correlations appear for some patterns above half-filling; below half-filling, the local-moment maxima are displaced from the repulsive to the free sites; the peak in the magnetic structure factor is displaced from  $q = \pi$ .<sup>1</sup> Still in one dimension, we find that superconducting correlations are favoured for the combination in which sites have either  $U < 0$  or  $U > 0$ , instead of the combination  $U < 0$  or  $U = 0$ .<sup>2</sup>

In two dimensions, the magnetic superlattice is made up of columns in which  $U \neq 0$  and those in which  $U = 0$ ; the "attractive" superlattice follows along similar lines. The magnetic properties are investigated within the Hartree-Fock approximation as well as by Monte Carlo simulations. We discuss the overall ground-state phase diagram in the parameter space of occupation and  $U$ .

1. T Paiva and R R dos Santos, Phys. Rev. Lett. 76, 1126 (1996).

2. T Paiva and R R dos Santos, XIX ENFMC (1996).

## APPEARANCE OF LOCAL MOMENTS AT X SITES IN $XFe_2$ COMPOUNDS: PRESSURE EFFECTS ( $X = Y, Lu$ ).

Marcus Vinicius Tovar Costa<sup>1</sup>, Nilson Antunes de Oliveira<sup>2</sup> and Amós Troper<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro, 22290-180, RJ, Brazil

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

Rua São Francisco Xavier 524, Rio de Janeiro, 20550-013, RJ, Brazil

*Key words:* Laves phase compounds, transferred moment, tight binding formalism

Using a single model to describe intermetallic cubic Laves phase compounds<sup>1</sup>,  $XFe_2$ , ( $X = Y, Lu$ ) we calculate the local magnetic moment at the X and Fe sites. The theoretical model consists basically on describing the two interpenetrating sublattices (X and Fe) within a tight binding formalism, with the simplifying approximation of five identical local d-subbands. Moreover, we disregard also s-p states and their hybridization to d-states. We discuss the effect of external applied pressure on the local magnetic moments at both sublattices, attributing pressure effects as acting mainly on the d-states. We assume that pressure acts on the system, modifying the widths of the sublattice bands and the parametrized spin-dependent hybridization between d-states involving the bands of the two sublattices. From the model we obtain a critical pressure  $p_c$ , defining the conditions in which the magnetization is transferred from the iron site to the X site, as claimed in recent experimental works<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> N. A. Oliveira, A. A. Gomes and A. Troper, Phys. Rev. B47, 11883 (1993).

<sup>2</sup> Y. Kasamatsu, J. G. M. Armitage, J. S. Lord, P. C. Ried, D. Fort. J. Magn. Magn. Mater 140-144, 819, (1995) and references therein.

(CNPq)

## SPIN-FLOP TRANSITION IN THE PLANAR ANTIFERROMAGNET $\text{FeTa}_2\text{O}_6$

Artur da Silva Carriço<sup>(1)</sup>, Luci Irene Zawislak<sup>(2)</sup>, João Batista Marimon da Cunha<sup>(2)</sup>, Gilberto Luiz Ferreira Fraga<sup>(2)</sup>, Denys Schmitt<sup>(3)</sup> and Carlos Alberto dos Santos<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>Departamento de Física Teórica e Experimental - UFRN

<sup>(2)</sup>Instituto de Física - UFRGS

<sup>(3)</sup>Laboratoire de Magnétisme Louis Néel - CNRS - Grenoble - France

**Palavras-Chave:** antiferromagnet, phase transition, spin-flop

Powder neutron diffraction and Mössbauer spectroscopy measurements, previously published, suggested, for  $\text{FeTa}_2\text{O}_6$ , a complex magnetic structure which consists of a stacking, along the c-axis, of two families of antiferromagnetic planes. Adjacent planes have perpendicular uniaxial anisotropies oriented along  $(110)$  and  $(\bar{1}10)$  directions. Our magnetization measurements performed with applied field up to 10 T in the temperature range from 1.4 K to 300 K, suggest a field induced phase transition at about 7 T, for temperatures between 1.4 K and 5 K. For higher temperatures, in the ordered phase, the inflection becomes progressively weaker, degenerating to a single line at about 12K. In order to interpret these experimental findings, we use an effective field model which allows for arbitrary orientation of the applied field with respect to anisotropy axis as well as temperature effects to be incorporated easily. We neglect the weak coupling between neighboring planes, as suggested by the low dimensional form of the temperature dependence of the specific heat. Furthermore, since our Mössbauer measurements have shown magnetic domains randomly oriented, we have made a uniform angular average over possible orientations of the applied field with respect to the anisotropy axis of both classes of antiferromagnetic planes comprising the  $\text{FeTa}_2\text{O}_6$  lattice. We have found that the large curvature change in  $M(H)$  at 1.4K is a signature of the sharp variations in magnetization induced by the spin-flop transition, corresponding to low angles between the applied field and the anisotropy axis. Raising the temperature reduce the relative weight of these contributions and makes the  $M(H)$  progressively smoother. The calculated field dependence of the magnetization for selected temperatures reproduce satisfactorily the experimental trend. This might be indicative of two dimensional behavior.

(CNPq, FINEP, CAPES, FAPERGS)

## DIAGRAMA DE FASES DE COMPOSTOS DE PRASEODÍMEO EM REDE CÚBICA

*Neemias Alves de Lima e Valter Luiz Líbero*  
Instituto de Física de São Carlos-USP, São Carlos-SP

**Palavras-chave:** praseodímeo, diagrama de fases, ponto-tricrítico

Devido ao forte acoplamento spin-órbita, íons de terra-rara, como cério, urânio ou praseodímeo, possuem momentos angulares totais bem definidos. Quando formam compostos, esses íons ficam na presença do campo cristalino gerado pelos outros íons da rede. A simetria desse campo deve ser levada em conta no cálculo de propriedades termodinâmicas a baixas temperaturas. Neste trabalho analisamos compostos à base de praseodímeo (Pr) em redes de simetria cúbica, com momento angular total  $j = 4$ , por exemplo,  $\text{PrAl}_2$ . Para isto, utilizamos um modelo tipo Heisenberg para os momentos magnéticos localizados nos sítios dos Pr. Por razões energéticas, consideramos em nosso modelo apenas o estado fundamental (dublete) e o primeiro estado excitado (triplete).<sup>2</sup> Devido a complexidade do Hamiltoniano, utilizamos a técnica de campo médio.<sup>1</sup> Obtido os autoestados do Hamiltoniano, calculamos a magnetização e a energia livre em funções da temperatura. Levantamos também o diagrama de fases e em particular, salientamos o aparecimento de um ponto tricrítico.

A exemplo do que ocorre em compostos a base de urânio com simetria hexagonal ( $\text{UPt}_3$ ), uma pequena interação de quadrupolo entre os íons de Pr poderá alterar o diagrama de fases.<sup>3</sup> Essa interação, possível graças aos graus de liberdade quadrupolares do dublete fundamental do íon Pr, está sendo implementada.

<sup>1</sup>L. Palermo, P. J. von Ranke e A. Caldas, Solid State Communications, Vol. 89, 865 (1994).

<sup>2</sup>Th. Frauenheim, W. Matz e G. Feller, Solid State Communications, Vol. 89, Vol. 29, 805 (1979).

<sup>3</sup>V. L. Líbero e D. L. Cox, Phys. Rev. B 48, 3783 (1993).

(CNPq, FAPESP)

## DIFUSÃO RÁPIDA DE Ni EM Zr

M.G. Fernandes<sup>(1,3)</sup>, A. Legris<sup>(2)</sup> e V. Pontikis<sup>(3)</sup>

- (1) Department of Materials Science and Engineering, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Avenue, Cambridge, Massachusetts 02139, E.U.A.
- (2) URA CNRS 234 Structure et Propriétés de l'Etat Solide, Laboratoire de Métallurgie Physique, USTL, Bât C6 2 étage, 59655 Villeneuve D'Ascq Cedex, França
- (3) Laboratoire des Solides Irradiés, CEA-CNRS URA 1380, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, França

*Palavras-chave:* Difusão sólida, Zircônio, Dinâmica Molecular

Difusão rápida de impurezas (DRI) em metais é caracterizada por coeficientes de difusão que são muitas ordens de magnitude maiores que o coeficiente de auto-difusão da matriz. Metais de transição do grupo IVB (Ti,Zr,Hf) são sistemas em que pequenos átomos como Ni e Fe apresentam este fenômeno. O problema de identificar as causas para DRI em metais compactos data de mais de vinte anos e com a crescente aplicação industrial desses materiais, o estudo desse fenômeno tem recebido considerável atenção. Neste trabalho apresentamos um modelo numérico de Dinâmica Molecular que reproduz DRI de átomos de Ni em hcp Zr. De acordo com o modelo, a impureza salta entre sítios intersticiais octaédricos com baixa energia de migração, consequência direta da presença de modos ressonantes de baixa frequência no espectro local de vibração da impureza e seus vizinhos. Nossos cálculos de energias de migração e dos fatores pré-exponenciais que entram na expressão do coeficiente de difusão estão em excelente acordo com os valores experimentais. Difusão paralela e perpendicular ao eixo c do cristal são assistidas por ressonâncias distintas, explicando assim a anisotropia da difusão de impurezas em Zr. Os valores obtidos no modelo para o coeficiente de anisotropia são da mesma ordem de magnitude dos valores experimentais.

## TRANSFORMAÇÕES DE FASES EM MINERAIS DO TIPO COLUMBITA-TANTALITA

Luci Irene Zawislak<sup>(1)</sup>, Volmir Antonietti<sup>(1)</sup>, Maria Socorro Adusumilli<sup>(2)</sup>, João Batista Marimon da Cunha<sup>(1)</sup> e Carlos Alberto dos Santos<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup>Instituto de Física - UFRGS

<sup>(2)</sup>Instituto de Geociências - UNB

*Palavras-Chave:* columbita-tantalita, ixiolita, wodginita

Os compostos do tipo  $AB_2O_6$ , onde, majoritariamente, A=Fe, Mn e B=Ta, Nb, podem ser cristalizados sob a forma tetragonal ou ortorrômbica. Em ambas as formas também é possível a inclusão de Co, Ni e Mg no sítio A. Além disso, impurezas de Ti e Sn são freqüentes nas ocorrências minerais. A fase ortorrômbica, objeto da presente comunicação, tem uma subestrutura denominada ixiolita. Estruturalmente, a ixiolita é considerada como uma forma desordenada da columbita, enquanto que quimicamente ela é associada aos compostos do tipo  $A_2O_6$ , geralmente contendo altos teores de  $SnO_2$  (entre 9% e 13% são valores indicados na literatura). Assim, a menos das reflexões de superestrutura, o difratograma de raios X da ixiolita é igual ao da columbita, dificultando sua identificação quando presente em pequenas proporções. Além disso, não é possível distinguir, a partir de resultados de difração de raios X, a columbita completamente desordenada, da ixiolita, a menos que o material seja submetido a determinado tratamento térmico. Objetiva-se na presente comunicação demonstrar a eficácia de tal procedimento e apresentar, pela primeira vez, os parâmetros hiperfinos da ixiolita e da wodginita, obtidos através da espectroscopia Mössbauer. De uma coleção de 28 amostras, coletadas em diferentes regiões do Brasil, três apresentaram difratogramas que podem ser associados à columbita desordenada ou, alternativamente, à ixiolita. Essas amostras foram submetidas ao seguinte tratamento térmico: recozimento durante 48 horas, à temperatura de 1050 °C, seguido de resfriamento lento durante 72 horas, até atingir a temperatura ambiente. Dessas três amostras, apenas uma apresentou claramente o padrão difratométrico da wodginita. A transformação ixiolita-wodginita fica particularmente evidente por causa do surgimento de um forte duplete entre  $d=2.95 \text{ \AA}$  e  $3.00 \text{ \AA}$ , em substituição à linha mais intensa da ixiolita. Resultados de espectroscopia Mössbauer, preliminarmente obtidos, mostram um duplete quadrupolar de  $Fe^{2+}$ , cujos parâmetros são semelhantes aos da columbita.

(CNPq, FINEP, CAPES, FAPERGS)

## EFEITO DO TRATAMENTO TÉRMICO SOBRE O ESPECTRO DE EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DO QUARTZO

*Murilo da Silva Navarro, Mário Ernesto Giroldo Valerio, José Fernandes de Lima*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, Campus Universitário  
49.100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

*Palavra-Chave:* termoluminescência, quartzo, datação

O quartzo é um material extremamente importante na datação arqueológica e geológica por Termoluminescência. A datação é feita comparando-se a intensidade TL da amostra natural com a intensidade das amostras submetidas a diferentes tratamentos térmicos e de radiação. A emissão TL está relacionada com a liberação de cargas armadilhadas em defeitos durante a irradiação. Esses defeitos podem ser modificados durante o tratamento térmico. Para que a comparação acima referida possa fazer sentido, é necessário que haja a garantia de que esses defeitos não foram modificados durante o tratamento térmico. Neste trabalho estudamos o efeito da temperatura de tratamento térmico sobre o espectro de emissão TL do quartzo natural. As medidas foram efetuadas com amostras em forma de pó com granulação entre 0,075 e 0,150 mm. As curvas de emissão foram registradas no intervalo de temperatura de 30 a 300 °C. Antes da irradiação com raios gama de  $^{60}\text{Co}$ , as amostras foram recozidas durante 1 hora em um forno de atmosfera aberta, em temperaturas de até 900°C. O espectro de emissão foi medido na faixa de 340 a 600 nm. A amostra natural, não tratada termicamente e irradiada com 300 Gy de raios gama de  $^{60}\text{Co}$  apresentou uma forte banda de emissão centrada em 470 nm. Por outro lado, a amostra recozida a 900°C por 1 hora apresentou uma banda estreita centrada em 380 nm e outra menos intensa em 450 nm. A amostra virgem e irradiada com 300 Gy apresentou um pico intenso e largo nas proximidades de 110°C. A amostra tratada a 900°C/1h e irradiada sob as mesmas condições apresentou o mesmo pico, porém com intensidade 20 vezes maior. Esses resultados levam a crer que para utilizarmos o pico em 110°C para datação devemos fazer correções nos resultados, visto que o tratamento térmico muda a sensibilidade desse pico.

## DEFEITOS INDUZIDOS POR IMPUREZAS DO GRUPO III EM GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO

*David Comedi e Ivan Chambouleyron*  
DFA-Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, Campinas SP

*Palavras-Chave:* defeitos, germânio amorfo, dopagem.

Os defeitos estruturais em um sólido cristalino são desvios das posições dos átomos em relação às ditas pela periodicidade da rede no espaço real. Nos sólidos amorfos, entretanto, os defeitos resultam de desvios locais da coordenação dos átomos em relação à coordenação energeticamente mais favorável do átomo majoritário. Em semicondutores amorfos tetraedricamente coordenados [o silício e o germânio hidrogenado (a-Si:H e a-Ge:H), por exemplo], o defeito mais comum é a ligação pendente (*dangling bond*), o qual provém de um átomo de Si ou Ge ligado trigonalmente. Este defeito possui um profundo impacto na determinação das propriedades optoeletrônicas dos mencionados materiais, pois é um a armadilha eficiente para os portadores de carga. Neste trabalho pesquisamos experimentalmente o efeito da introdução de pequenas concentrações (até 1% at.) de diferentes impurezas da coluna III da Tabela Periódica (Al, Ga e In) na densidade de ligações pendentes ( $N_D$ ) e na posição do nível de Fermi ( $E_F$ ) em a-Ge:H. As amostras foram crescidas por *rf-sputtering* usando fontes sólidas de Ge e da impureza. As mudanças em  $N_D$  foram determinadas a partir da absorção óptica *subgap* medida através da técnica da espectroscopia de deflexão fototérmica (*photothermal deflection spectroscopy* - PDS). Foi achado que a introdução das impurezas produz um deslocamento gradual de  $E_F$  em direção à banda de valência (dopagem tipo p). Para concentrações atômicas de impurezas ( $N_{imp}/N_{Ge}$ ) maiores que  $5 \times 10^{-4}$ , deu-se um aumento abrupto de  $N_D$ . Os valores de  $N_D$ , quando graficados em função de  $N_{imp}/N_{Ge}$ , revelam um mesmo comportamento para Al, Ga, e In, porém observa-se uma dependência diferente para impurezas diferentes, quando  $N_D$  é graficado em função de  $E_F$ . Este resultado é diferente do esperado de acordo com o mecanismo de equilíbrio proposto na literatura para o a-Si:H, o qual supõe que o aumento de  $N_D$  resulta de uma diminuição da energia de formação do defeito, induzida pelo deslocamento de  $E_F$ . Propomos, então, um mecanismo alternativo o qual explica a dependência de  $N_D$  em função de  $N_{imp}/N_{Ge}$  satisfatoriamente.

## INFLUÊNCIA DO $\text{Sr}^{2+}$ E DO $\text{Mn}^{2+}$ NA EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DA CALCITA

*Zélia Soares Macêdo, Mário Ernesto Giroldo Valerio e José Fernandes de Lima*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, Campus Universitário  
49.100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

*Palavras-Chave:* termoluminescência, calcita,  $\text{CaCO}_3$ : $\text{Sr}^{2+}$

Estudos realizados com calcita natural mostraram comportamentos termoluminescentes distintos em amostras contendo diferentes tipos de impurezas. Observou-se ainda, em cristais de  $\text{CaCO}_3$  crescidos artificialmente, que o tipo e a concentração da impureza pode modificar tanto a intensidade quanto a forma da curva de termoluminescência. Os íons  $\text{Mn}^{2+}$  e  $\text{Pb}^{2+}$  são conhecidos ativadores da emissão termoluminescente, enquanto a presença de  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  e  $\text{Ni}^{2+}$  suprimem a emissão. No presente trabalho estudamos a emissão TL dos cristais de calcita dopados com diferentes concentrações de  $\text{Mn}^{2+}$  e  $\text{Sr}^{2+}$ . Os cristais foram crescidos pelo gotejamento de uma solução de  $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$  em uma solução contendo  $\text{CaCl}_2$  e pequenas alíquotas das impurezas. Foram utilizados cristais de tamanho entre 0.075 e 0.149 mm. As curvas de emissão TL foram registradas para um intervalo de temperaturas entre 27°C e 300°C, com uma taxa de aquecimento de 3°C/s. As amostras dopadas apenas com  $\text{Sr}^{2+}$  e irradiadas com 150 Gy de raios gama de  $^{60}\text{Co}$  apresentaram picos de TL pouco intensos. Por outro lado, as amostras de calcita dopadas com  $\text{Mn}^{2+}$  apresentaram três picos bem pronunciados, a temperaturas de aproximadamente 120 °C, 170 °C e 220 °C. Amostras dopadas com  $\text{Mn}^{2+}$  e  $\text{Sr}^{2+}$  simultaneamente e irradiadas sob as mesmas condições mostraram que a presença dos íons  $\text{Sr}^{2+}$  provoca um aumento na intensidade dos picos a 120 °C e 170 °C. Em amostras submetidas a tratamento térmico e irradiação, a presença do íon  $\text{Sr}^{2+}$  afeta em especial o pico de emissão em 120°C, que é sensivelmente maior para os cristais dopados com  $\text{Mn}^{2+}$  e  $\text{Sr}^{2+}$  do que para os cristais que contêm apenas  $\text{Mn}^{2+}$ . Estes resultados confirmam que o  $\text{Mn}^{2+}$  é o principal centro de luminescência da calcita, e apontam o íon  $\text{Sr}^{2+}$  como o responsável pela estabilização das armadilhas associadas aos picos em 120 e 170 °C.

## ESR STUDY OF $\text{Co}^{2+}$ IN $\text{NH}_4\text{NiPO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

*A. Goñi, L. Lezama and T. Rojo*

Departamento de Química Inorgânica, Facultad de Ciencias, Universidad del País Vasco,  
Apartado 644, 48080 Bilbao, Spain.

*J. A. Valdivia and G. E. Barberis*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, 13083-970, Campinas-SP, Brazil.

*Palavra-Chave:*  $\text{Co}^{2+}$ , crystal field, Electron Spin Resonance

$\text{NH}_4\text{NiPO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  was studied by the Electron Spin Resonance (ESR) technique in powder and crystal samples.  $\text{NH}_4\text{NiPO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  crystallizes in the  $\text{Pmn}2_1$  space group, and it is isomorphous to struvite: Co ion substitutes Ni in the structure, where the first neighbours are water molecules constituting a slightly distorted octahedron around it. There are two different octahedra per unit cell, corresponding to two magnetically inequivalent sites for Co. We prepared samples substituting Ni by Co in low concentration (less than 0.1%), and measured by ESR using a X-band Bruker spectrometer, at 4.2K.

The experiments show an almost completely resolved hyperfine structure for two principal directions, and a big reduction of the hyperfine parameter for the third direction.  $\text{Co}^{2+}$  in a regular octahedron presents a  $\Gamma_6$  Kramer's doublet as the ground state, and can be represented by a spin-Hamiltonian for  $S=1/2$  and  $I=7/2$ . The small distortions of the octahedron will make the g-value and hyperfine tensors anisotropic, but as the distortions are small, the mean g-value will be near the pure cubic value.

A powder simulation program can estimate a first set of spin-hamiltonian parameters, and reproduce well the experimental spectra. The angular variation of the crystal spectra can be fitted by a spin-Hamiltonian considering the two inequivalent sites of the Co. For each site, the principal directions of the Zeeman and hyperfine tensors were rotated respect to the cristalline axes. The fitting process was performed using an exact diagonalization of the hamiltonian matrix, and the parameters adjusted by minimum square method.

## INVESTIGAÇÃO DA ADIÇÃO DE FERRO EM $ZrO_2-CeO_2$ PELA ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS EXCITADOS POR RAIOS-X (XPS)

César R. Foschini<sup>1</sup>, Dulcina M.P.F. de Souza<sup>1,2</sup>, Pedro I. Paulin Filho<sup>1,2</sup>, Pedro A.P. Nascente<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais / UFSCar

<sup>2</sup>Departamento de Engenharia de Materiais / UFSCar

<sup>3</sup>Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais / UFSCar / UNESP

**Palavras-Chave:**  $ZrO_2-CeO_2$ , estado de oxidação, espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X

Zircônia tetragonal estabilizada com céria apresenta elevada tenacidade, atendendo às aplicações estruturais. A estabilização da fase tetragonal na temperatura ambiente da zircônia-céria pode ser explicada baseando-se na diferença dos raios iônicos de  $Zr^{4+}$  e  $Ce^{4+}$ , porém ainda não existe na literatura um modelo estabelecido.  $ZrO_2-CeO_2$  apresenta uma baixa sinterabilidade, o que tem motivado estudos sobre aditivos que auxiliem a sinterização. Determinamos, em trabalhos anteriores, que a presença de 0,3 % molar de  $Fe_2O_3$  favorece a sinterização e promove um aumento de 3 vezes na condutividade elétrica do grão e de 10 vezes na condutividade elétrica do contorno de grão. Este acréscimo pode estar relacionado ao aumento na concentração de vacâncias de oxigênio devido à substituição dos íons de zircônio por íons de ferro, ou devido ao aumento da condutividade eletrônica devido à presença de  $Fe^{+2}$  e  $Fe^{+3}$ . Portanto, a determinação da valência do ferro é fundamental para a interpretação desses resultados. As amostras policristalinas foram preparadas pela mistura mecânica dos óxidos, prensagem isostática a 230 MPa e sinterização a 1450 °C. A espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (*X-ray photoelectron spectroscopy* - XPS) foi empregada para identificar o estado de oxidação dos elementos presentes nas superfícies das amostras polidas. O estado de oxidação pode ser determinado pelo deslocamento das energias de ligação dos elétrons dos níveis de caroço, que são suficientemente afetadas pelo ambiente químico do átomo emissor. Analisamos os deslocamentos químicos das linhas Fe 2p, Zr 3d, Ce 3d e O 1s. Os resultados indicam que o ferro encontra-se nas valências +2 e +3.

## EXPERIMENTAL STUDY OF QUANTUM CONDUCTANCE EFFECTS IN METALLIC NANOWIRES

*Varlei Rodrigues, Daniel Ugarte*

Lab. Nac. Luz Síncrotron (CNPq / MCT), Cx. P. 6192, 13081-970 Campinas SP, Brasil.

*Key Words:* quantum effects, conductance, nanowire

Advances in miniaturization of electronic devices, have generated a great interest in mesoscopic effects. In a ballistic wire, where the electron mean free path is much larger than the sample size, the conductance is quantized in units of  $G_0 = 2 e^2/h$ . Experimentally, a ballistic wire may be generated by a metallic point contact, as may be obtained with a scanning tunneling microscope, when the tip touches the sample. This approach has demonstrated the existence of jumps in the conductance of the point contact, but the reported values do not always correspond to integer multiples of  $G_0$ . Recently, it has been demonstrated (Costa-Kramer et al, Surf. Sci. 342 (1995) L1144) that contacts between macroscopic wires may also be used to observe steps in conductance curves. This experiment is very simple and can be performed in air and at room temperature. We have measured the conductance of touching wires of gold and copper, and observed well defined steps in conductance curves. In particular, our results indicate that in addition to integer values, the conductance is often present with fractional values, the most frequent ones belonging to series based on  $G_0/3$ . Further studies are in progress in order to associate these fractional values to possible causes as structural disorder, impurities, or electron wave interference.

## EFEITOS DE UMA DESLOCAÇÃO NA DINÂMICA DE ELÉTRONS NUM METAL

*Fernando Moraes*

Departamento de Física, UFPE - 50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras-Chave:* deslocação, metais, teoria

Muitas propriedades dos materiais estão associadas à presença de defeitos em seu meio. Propriedades como a condução elétrica em metais, por exemplo, são profundamente afetadas por defeitos topológicos como a deslocação. Entretanto, a assimetria introduzida por deslocações no meio torna difícil o estudo das propriedades dinâmicas de objetos movendo-se entre elas. No contexto da teoria geométrica dos defeitos topológicos de Katanaev e Volovich (Ann. Phys. (NY) 216 (1992) 1), partículas pontuais movendo-se na presença de um defeito topológico descrevem geodésicas. Portanto, uma maneira de se ganhar alguma compreensão sobre o movimento de partículas em um meio contendo defeitos topológicos é observar o fluxo de geodésicas no meio em volta do defeito. A equação de Hamilton-Jacobi para as geodésicas em volta de uma deslocação é obtida a partir da ação proveniente da métrica do meio deformado. A solução da equação das geodésicas é resolvida perturbativamente em primeira ordem no vetor de Burgers dando  $y = A + Bx + \frac{b}{2\pi} \left[ \frac{1}{2} \ln(x^2 + y^2) + B \arctan\left(\frac{x+By}{Bx-y}\right) + 1 \right]$ , onde  $b$  é o módulo do vetor de Burgers, que está orientado ao longo do eixo  $x$ . Note que para  $b = 0$  recupera-se a equação das geodésicas no meio na ausência de defeitos ( a reta  $y = A + Bx$ ). Em suma, uma única deslocação causa uma dilatação que quebra a simetria de translação da rede cristalina (tratada aqui como um contínuo) causando uma deformação das geodésicas em volta do defeito. Feixes de geodésicas em diferentes orientações com relação ao defeito são mostradas dando uma idéia intuitiva sobre o movimento clássico de elétrons num metal com uma deslocação. Este trabalho está descrito em detalhe no preprint cond-mat/9512086, aceito para publicação no Phys. Lett. A.

(CNPq)

## CLUSTER-CUMULANT EXPANSION OF THE HUBBARD HAMILTONIAN

*E. Anda<sup>1</sup>, G. Chiappe<sup>2</sup>, V. Ferrari<sup>2</sup>*

1 Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense,  
Niterói-RJ, Brazil.

2 Departamento de Física, Universidad de Buenos Aires,  
Buenos Aires, Argentina.

*Palavras-chave: Highly correlated electrons, Hubbard Hamiltonian, Metal-nonmetal transition*

In the last years there have been different studies of the Hubbard Hamiltonian based upon a locator-propagator diagrammatic expansion for the Green functions of the system. This approaches take the local many-body interaction as the unperturbed Hamiltonian and the one-body kinetic energy as the perturbation. Although in this formulation there is no Wick Theorem to be applied, it is possible to elaborate a cumulant expansion and to write a Dyson equation for the Green function. (E.V. Anda, J.Phys.C, 21, L234, 1981; W.Metzner, Phys.Rev.B, 43, 8549, 1991)

Within this framework, we develop in this work a calculation of the one-particle propagator of the Hubbard Hamiltonian which takes as the unperturbed system a cluster of  $n$  atoms and the one-body interactions among the clusters as the perturbation. The expansion is restricted to the "chain" type diagrams. The non-perturbed propagator for the cluster and its mean value as a function of the electronic population is numerically obtained before embedding it in the lattice.

The formalism is applied to the study of a linear chain for which it is possible the comparison with exact results. We calculate the density of states, the energy and the gap as a function of the electronic interaction  $U$  and of the number of particles. The theory is applied as well to a bidimensional system and a Bethe lattice. For the case of one electron per atom the metal-nonmetal transition is studied as a function of the parameter  $U$ . We propose an extension of the theory to incorporate other topological families of diagrams including the spin flip ones.

(CNPQ, Fund. Vitae)

## OBTENDO INFORMAÇÃO DE PROPRIEDADES ELÉTRICAS E MAGNÉTICAS A PARTIR DE LINHAS DYSONIANAS.

*Lygia Walmsley*

Depto de Física, IGCE, UNESP, C.P. 178, CEP 13500-970, Rio Claro, S.P.

*Palavras-Chave: ressonância paramagnética eletrônica, elétrons de condução, metais sintéticos.*

A teoria de forma de linha de Ressonância Paramagnética Eletrônica de elétrons de condução foi desenvolvida por Dyson e desde então a linha de ressonância de elétrons de condução é conhecida como dysoniana. Em geral essa linha é descrita como função de 2 parâmetros,  $\lambda = d/\delta$  ( $d$  sendo a espessura da amostra e  $\delta$  o comprimento de penetração do campo de microondas) e  $R = (T_D/T_2)^{1/2}$ , ( $T_D$  sendo o tempo de difusão dos spins através do comprimento de penetração e  $T_2$  o tempo de relaxação do spin). No limite ( $d < \delta$  ou  $\sim \delta$ ) a linha é função apenas do parâmetro  $\lambda$ . Neste limite é possível obter a condutividade na frequência da ressonância a partir do parâmetro de assimetria da linha ( $A/B$ ), que neste caso está univocamente relacionado com  $\lambda$ . A condutividade é então escrita como sendo  $\sigma = \lambda^2 / (d^2 \pi v_0 \mu)$  onde  $\mu = \mu_0$  é a permissividade do vácuo e  $v_0$  é a frequência da microonda. Este limite da teoria de Dyson é alcançado em metais sintéticos de baixa dimensão, como intercalados de grafite, polímeros condutores, compostos da família do  $C_{60}$  e compostos ET. Para esses materiais linhas dysonianas de RPE são facilmente observadas numa ampla faixa de temperaturas. Uma vez que a condutividade nesses materiais é algumas ordens de grandeza menor que em metais normais, o limite ( $d < \delta$  ou  $\sim \delta$ ) pode ser conseguido escolhendo-se as dimensões da amostra de forma apropriada. Apesar da assimetria da linha ser muito útil para a determinação da condutividade, ela introduz problemas na determinação dos valores de  $g$  e na largura de linha pico-a-pico. A linha dysoniana mostra um campo aparente de ressonância que é maior que o real, o mesmo acontecendo com a largura de linha pico-a-pico. Medidas de área também são mais complicadas. Neste trabalho nós fitamos a linha dysoniana no limite ( $d < \delta$  ou  $\sim \delta$ ) com uma combinação de linhas lorentzianas de absorção e dispersão, permitindo a determinação do valor real de  $g$ , da largura de linha, da susceptibilidade paramagnética e da condutividade, a partir dos parâmetros experimentais da linha dysoniana.

## EXPANSÃO EM CUMULANTES DA REDE DE ANDERSON PARA DIMENSÃO INFINITA

Mario E. Foglio

Instituto de Física Gleb "Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, SP

Marcos S. Figueira

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, RJ

*Palavras-Chave:* rede de Anderson, expansão em cumulantes, dimensão infinita

O limite de dimensão infinita numa rede hipercúbica tem sido aplicado com sucesso ao estudo de problemas de elétrons fortemente correlacionados (W. Metzner e D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. 62 324). No caso do modelo de Hubbard, W. Metzner (Phys. Rev B 43, 8549 (1991)) aplicou a expansão em cumulantes usando o "hopping" como perturbação. O modelo de Anderson também tem sido estudado considerando-se uma rede hipercúbica de dimensão infinita, usando-se a expansão em cumulantes onde a perturbação é a hibridização (XVIII ENFMC, M. E. Foglio e M. S. Figueira, pg 185). Neste último tratamento, o Hamiltoniano não perturbado contém o dos elétrons de condução, que é diagonalizado exatamente. Esta escolha é adequada quando a largura de banda é muito maior que a energia de hibridização, como é habitualmente o caso nos fermions pesados e outros sistemas de interesse.

Usando o "hopping" como perturbação, Metzner provou para o modelo de Hubbard que muitos diagramas da expansão perturbativa se anulam, dando lugar a um "colapso de vértices". No presente trabalho foi possível estender esta propriedade à expansão em cumulantes da rede de Anderson, usando uma hibridização local como perturbação. Esta extensão não é trivial dado que na solução de ordem zero já aparecem todas as ordens de "hopping" na energia dos elétrons de condução, e foi necessário modificar a derivação usada por Metzner para o modelo de Hubbard.

Os resultados obtidos para dimensão infinita sugerem, para dimensão finita, uma aproximação das funções de Green de uma partícula que descreve razoavelmente a densidade espectral dos elétrons  $f$ .

(FAPESP, CNPq, FAEP-Unicamp)

## DISPERSÃO DE FÔNONS EM ALGUNS METAIS DE ESTRUTURA HCP

*Madan Mohan Shukla*

Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP - Câmpus de Bauru

*Palavras-chave:* fônons, curva de dispersão, metais hcp

Dinâmica de rede de metais com estrutura cristalina hexagonal compacta (hcp) é bem complicado em comparação com a dinâmica de rede de metais com estrutura cristalina cúbica simples, pelo fato de que na estrutura hcp existem dois átomos por célula unitária. Esta fato provoca a existência de ondas óticas na curva de dispersão de fônons, além de ondas acústicas. O primeiro estudo teórico de metais hcp foi efetuado em 1957<sup>1</sup> e depois disto, dezenas de modelos teóricos foram desenvolvidos<sup>2,3</sup>. Recentemente<sup>4</sup>, nós propusemos um modelo fenomenológico para estudar a dinâmica de rede em metais hcp. Nós dividimos a força interatômica presente no metal em duas partes, isto é, a parte iônica e a parte eletrônica. A força de interação ion-ion em metais são calculadas por intermédio do derivativo do potencial de Morse efetivo para a interação dos três primeiros vizinhos. A força eletrônica é considerada pelo potencial Coulombiano incluindo um processo de Unklapp. A parte iônica da matriz dinâmica contém seis parâmetros e a parte eletrônica contém um parâmetro. Esses parâmetros são determinados pelos valores experimentais de constantes elásticas e fônons em alguns pontos da zona de Brillouin. Nós estudamos quatro metais com estrutura hcp, isto é, berílio, zinco, yttrio e hafnio. Pelo nosso procedimento, calculamos a curva de dispersão nas direções de simetria [0001], [0110] e [1120] e comparamos o resultado teórico com valores experimentais de fônons.

<sup>1</sup> L. J. Slutsky and C. W. Garland, J. Chem. Phys., 26, 787 (1957).

<sup>2</sup> M. M. Shukla and H. Closs, Sol. State Comm., 13, 813 (1973).

<sup>3</sup> N. Singh, Phys. B 203, 22 (1994).

<sup>4</sup> A. C. Souza and M. M. Shukla, Abstracts of XIII SLAFES, pag. CPT18c, Gramado (RS), 1995.

## CRESCIMENTO COM CASAMENTO DE PARÂMETRO DE REDE DE InGaP SOBRE GaAs PELA TÉCNICA DE EPITAXIA POR FEIXE QUÍMICO EM VÁCUO (CBE)

J.BETTINI, M.M.G.DE CARVALHO, C.A.C. MENDONÇA, W.CARVALHO\*, M.A.COTTA E E.A.MENEZES

LPD - LSA -IFGW -UNICAMP

\* CPqD - TELEBRÁS

*Palavras-chave* : epitaxia, cbe/mombe, InGaP

**Resumo** - Através do espectro de fotoluminescência, análise da difração de R-X e simulação da mesma, foi constatada uma variação na composição da liga das camadas de InGaP crescidas em nosso reator CBE, com o comprometimento da sua qualidade cristalina. Conseqüentemente foram feitas algumas modificações no sistema de introdução dos gases no reator. Neste trabalho serão apresentados os resultados das caracterizações (efeito hall, fotoluminescência e R-X) das camadas obtidas antes e após a modificação no sistema, a caracterização de estruturas de múltiplo poço quântico obtidos com InGaP/GaAs, bem como evidências de ordenamento da liga, uma das dificuldades intrínsecas no crescimento do material.

## CRESCIMENTO EPITAXIAL POR FEIXE MOLECULAR (MBE) DE CAMADAS DE PbSnTe SOBRE Si(111)

*S.O. Ferreira, E. Abramof, C. Boschetti, H. Closs, I.N. Bandeira, P.H.O. Rappi.*

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE  
Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS  
CP 515 - São José dos Campos - SP. sukarno @ las.inpe.br

*Palavras-Chave*: PbSnTe, epitaxia por feixe molecular, caracterização

Camadas epitaxiais de  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  foram crescidas sobre substratos de Si(111) utilizando-se a técnica de epitaxia por feixes moleculares (MBE). Foi utilizado um sistema MBE RIBER P32, equipado com seis células de efusão: CaF<sub>2</sub>, BaF<sub>2</sub>, PbTe, SnTe,  $Pb_{0.8}Sn_{0.2}Te$  e Te. Como estes compostos sublimam congruientemente, é possível utilizar-se o composto no lugar de cada elemento em separado. A fonte de Te é usada para se ajustar a estequiometria, controlando o tipo de portador na liga, e os compostos CaF<sub>2</sub> e BaF<sub>2</sub> são utilizados como camadas intermediárias (buffers) entre o Telureto e o Si, devido à grande diferença de parâmetro de rede e de coeficiente de dilatação térmica entre ambos. A pressão na câmara, durante o crescimento, é mantida abaixo de 5e-10 Torr. Os crescimentos são monitorados através de difração de elétrons de alta energia (RHEED) e um sistema de aquisição e processamento de imagens é utilizado para medir as oscilações de RHEED e estudar o regime de crescimento e as reconstruções da superfície. Foram crescidas camadas simples com diferentes concentrações de estanho e super-redes de PbTe/PbSnTe. Na caracterização das amostras foram utilizadas as técnicas de difração de raios-X, medida de efeito Hall à baixas temperaturas e medidas de transmissão e reflexão no infra-vermelho à temperatura ambiente e 77 K.

## FABRICAÇÃO DE VIDROS SEMICONDUTORES $Se_xZn_{1-x}$ POR MECHANICAL ALLOYING

*João Cardoso de Lima, Rafaela R. Samagaia, Vitor Hugo F. dos Santos, Tarciso A. Grandi*  
Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-chave:* semicondutores, mechanical alloying, filtros IR

Do ponto de vista tecnológico, a liga equiatômica  $SeZn$  possui aplicação na indústria óptico-eletrônica na área de filtros para a região do infravermelho. Do ponto de vista fundamental, os elementos  $Se$  e  $Zn$  são imiscíveis no estado líquido qualquer que seja a composição, com uma única exceção para a composição equiatômica  $SeZn$ , onde uma fase se forma na interface das duas camadas líquidas. É bem conhecido que Mechanical Alloying (MA) é um processo de moagem mecânica a seco, onde uma mistura de pós é ativamente deformada em uma atmosfera controlada, sob uma carga de esferas altamente energética produzindo um pó metálico composto. As temperaturas alcançadas no processo MA são muito baixas, o que reduz a cinética da reação e permite assim a produção de materiais metaestáveis ou amorfos. No caso de materiais metaestáveis, um tratamento térmico é necessário a fim de realizar uma relaxação estrutural. Neste trabalho, mostramos que ligas  $Se_xZn_{1-x}$  podem ser obtidas por reação no estado sólido dos elementos  $Se$  e  $Zn$  através do uso da técnica MA. Para a composição equiatômica, a liga  $SeZn$  policristalina produzida possui uma célula unitária f.c.c. com constante de rede  $a = 5,6389\text{Å}$ , enquanto que para as composições com  $x = 0,10; 0,20; 0,30$  e  $0,40$  at%  $Se$  uma mistura da fase f.c.c. encontrada na composição equiatômica com a fase h.c.p. do zinco puro foi obtida. O valor  $a = 5,6389\text{Å}$  está em bom acordo com valores encontrados na literatura para a fase f.c.c. ( $a = 5,65\text{Å}$ ,  $a = 5,667\text{Å}$  e  $a = 5,672\text{Å}$ ). Foi também observado que a quantidade de fase f.c.c. aumenta com  $x$  crescente. A fase metaestável h.c.p. (obtidas em altas pressões) da composição equiatômica não foi obtida.

(CNPq/CAPES)

## ESTUDOS POR SAXS DE NANOCRISTAIS SEMICONDUTORES DE $PbTe$ EM MATRIZ DE VIDROS SILICATOS

*Aldo Felix Craievich<sup>(1,2)</sup> Oswaldo Luiz Alves<sup>(3)</sup>, Luiz Carlos Barbosa<sup>(4)</sup>*

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron  
Caixa Postal 6192, 13083-970 Campinas, SP

<sup>(2)</sup>Instituto de Física - USP - São Paulo, SP

<sup>(3)</sup>Laboratório de Química do Estado Sólido/UNICAMP  
Caixa Postal 6154, 13083-970 Campinas, SP

<sup>(4)</sup>Instituto de Física/UNICAMP  
Caixa Postal 6165, 13083-970 Campinas, SP

*Palavras-Chave:* SAXS, nanocristais de  $PbTe$ , vidros silicatos

Vidros silicatos dopados com  $Pb$  e  $Te$  se transformam, mediante tratamentos térmicos apropriados, num material compósito constituído por uma matriz vítrea na qual se encontram imersos nanocristais semicondutores de  $PbTe$ . Este material apresenta propriedades óticas não lineares no infravermelho, na faixa de  $10-20.000\text{Å}$ . O material estudado foi homogeneizado a  $1300^\circ\text{C}$  e resfriado rapidamente até temperatura ambiente para receber, depois, tratamentos térmicos a temperatura constante ( $650^\circ\text{C}$ ). Os espectros de absorção ótica apresentam o "blue-shift" da borda de absorção associado ao efeito de confinamento quântico no material. Os espectros de absorção mostram a existência de picos excitônicos bem definidos. Foi determinada a intensidade do espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS) para diversos tempos de tratamento térmico visando caracterizar a forma e o tamanho dos nanocristais e estudar a cinética de crescimento dos mesmos. As experiências foram realizadas na linha de SAXS D24 do laboratório de luz síncrotron LURE (Orsay, França) utilizando uma câmara de altas temperaturas para estudos "in situ". Os resultados mostram que a cinética de crescimento dos nanocristais é governada pelo mecanismo clássico de difusão atômica. A forma dos nanocristais é esférica, o seu raio médio aumenta até atingir  $32\text{Å}$  após duas horas a  $650\text{C}$  e a dispersão relativa de tamanhos é de aproximadamente 10%. Os raios médios dos nanocristais determinados por SAXS concordam com os valores estimados a partir da aplicação da equação de Efron e Efron aos resultados das experiências de absorção ótica.

## VIDROS DOPADOS COM PONTOS QUÂNTICOS DE PbTe: FABRICAÇÃO E PROPRIEDADES ÓPTICAS

C.L. Cesar, A.M. de Paula, V.C.S. Reynoso, O.L. Alves\*, C.H. de Brito Cruz e L.C. Barbosa  
Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas, SP

\*Instituto de Química, Caixa Postal 6154

**Palavras-Chave:** PbTe, pontos quânticos, propriedades ópticas

Vidros dopados com pontos quânticos de semicondutores apresentam propriedades ópticas não lineares com potencial aplicação em dispositivos ópticos. Do ponto de vista do dispositivo óptico deseja-se um material de alta não-linearidade, mas que também seja ultrarápida. Demonstração de um dispositivo óptico operando na taxa de 250 Gbits/segundo utilizando pontos quânticos de CdTe foi recentemente realizada [1]. Vários estudos do confinamento quântico de elétrons e fônons em vidros dopados com CdTe, CdSe, CdS e suas ligas ternárias também têm sido realizados [2]. Entretanto todos esses materiais apresentam o gap óptico na região do visível (em torno de 0,6  $\mu\text{m}$ ) enquanto as janelas ópticas para comunicações ocorrem no infravermelho (1,3 e 1,5  $\mu\text{m}$ ). O PbTe bulk apresenta band gap em torno de 3,6  $\mu\text{m}$ , o qual somado a energia de confinamento quântico pode trazer o gap óptico para a região de 1-2  $\mu\text{m}$ . Fabricamos duas séries desse tipo de amostra cujo gap óptico variou de 1,2  $\mu\text{m}$  até 2,2  $\mu\text{m}$ . A posição do gap óptico é controlada variando o tamanho dos pontos quânticos. Espectroscopia de absorção mostra vários picos típicos de confinamento quântico em microcristalitos com baixa dispersão de tamanhos. O pico da luminescência coincide com o pico de absorção indicando a baixa concentração de armadilhas de níveis profundos de superfície. Atualmente estamos no processo da medida resolvida no tempo (em femtossegundos) do índice de refração não linear, que definirá a possibilidade do uso desse material em dispositivos ópticos reais.

[1] K. Tsunetomo *et al.*, Nonlinear Opt. aceito para publicação.

[2] C. R. M. de Oliveira *et al.* Appl. Phys. Lett. 66, 439 (1995). Norris *et al.*, Phys. Rev. Lett. 72, 2612 (1994), Schanne *et al.*, Appl. Phys. Lett. 67, 579 (1995).

## INTERAÇÕES DE TROCA ANTIFERROMAGNÉTICAS FRACAS EM SEMICONDUCTORES MAGNÉTICOS DILUÍDOS

V. Bindilatti<sup>a</sup>, N.F. Oliveira Jr.<sup>a</sup>, E. ter-Haar<sup>a</sup> e Y. Shapira<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física da Universidade de São Paulo - SP, Brasil

<sup>b</sup> Tufts University - Medford, MA - EUA

**Palavras-Chave:** interação de troca, sistemas magnéticos diluídos.

Interações antiferromagnéticas em sistemas magnéticos diluídos dão origem ao fenômeno dos degraus de magnetização em temperaturas suficientemente baixas. Tais degraus têm sua origem no diagrama de níveis de energia de pares de íons magnéticos, cujo estado fundamental muda com o campo magnético. Os degraus de magnetização permitem determinar a intensidade da interação de troca, bem como identificar o tipo de par envolvido (primeiros vizinhos, etc). Empregamos medidas de curvas de magnetização em temperaturas em torno de 20mK para estudar interações antiferromagnéticas fracas,  $|J|/k_B < 1\text{K}$ , em semicondutores magnéticos diluídos (SMD). Uma teoria baseada em cálculos detalhados da estrutura de bandas do  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  (Larson *et al.*, Phys. Rev. B 37, 4137 (1988)), explica muito bem o comportamento da constante de troca entre primeiros vizinhos,  $J_1$  (da ordem de  $-10\text{K}$ ), através da série dos SMD do tipo  $\text{A}_{1-x}\text{Mn}_x\text{B}$  (A=Zn, Cd e B=S, Se, Te). Sobre as constantes de troca entre vizinhos mais distantes, esta teoria prevê um comportamento universal dentro da série de materiais, em que  $J_n$  é proporcional à constante  $J_1$ , decaindo monotonicamente com a distância entre os íons magnéticos. Apresentaremos resultados das primeiras medidas diretas de  $J_2$  e/ou  $J_3$  em amostras da série  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{B}$  (B=S, Se, Te). Estas constantes de troca são da ordem de  $-0,5\text{K}$ , e seu comportamento através da série de materiais está em desacordo com tais previsões.

## INTERFACE ROUGHNESS AND PERIODICITIES IN Ge/Si MICROSTRUCTURES STUDIES BY EXPERIMENTAL AND NUMERICALLY SIMULATED RAMAN SCATTERING

*M. A. Araújo Silva<sup>a</sup>, E. Ribeiro<sup>b</sup>, F. Cerdeira<sup>b</sup>, P.A. Schulz<sup>b</sup> and J. C. Bean<sup>c</sup>*

<sup>a</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

<sup>b</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Unicamp

<sup>c</sup>AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey, USA

**Palavras-Chave:** Interface roughness, microstructures, Raman scattering

The Raman spectra of samples of type  $[(\text{Ge}_n\text{Si}_m)_N-1 \text{Ge}_n\text{Si}_m] \times p$  with  $n \sim m \sim 5$  monolayers,  $M \sim 200$  monolayers and  $p \sim 10-20$  were measured in backscattering in the frequency range of  $2-600 \text{ cm}^{-1}$ . The experimental results are discussed by comparison with simulated spectra calculated with a linear chain model with bond polarizabilities for the Raman intensities. Comparison between experimental and theoretical spectra gives insight into the sensitivity of the different Raman peaks of probes of periodicity and interface roughness length scales. The lowest wave number modes serve to obtain reliable values of the larger period. In the middle wave number range, the Raman spectrum show that only a few periods are needed to obtain features characteristic of a true superlattice, such as folded acoustical phonons from the  $\text{Ge}_n\text{Si}_m$  strings nested within the larger structure. Finally, optical phonons ( $250 \text{ cm}^{-1} < \omega < 550 \text{ cm}^{-1}$ ) are totally insensitive to the larger scale structure of the sample and they are the same as those of  $\text{Ge}_n\text{Si}_m$  infinite superlattice. In this region of the spectrum the lines are broad and asymmetric and their shape is strongly dependent on the photon frequency of the incident laser. This behavior is successfully explained in terms of selective resonant Raman scattering by electronic transitions confined into terraces of lateral dimensions of  $\sim 10 \text{ nm}$ : Judicious use of the model permits a quantitative study of the variations in the lineshape and position of the Ge-Ge line as the laser-line frequency changes. This study confirms the existence of terraces and favors the interpretation of the resonance appearing in the Raman cross-section as originating in  $E_1$ -like transitions of bulk Ge modified by effects of confinement and zone folding.

(CNPq)

## RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DETECTADA ELETRICAMENTE DE HETEROESTRUTURAS DE Si/SiGe

*C.F.O. Graeff, M. Holzmann, M.S. Brandt e M. Stutzmann*

Walter Schottky Institut, TU-München, D-85748 Garching, Alemanha

**Palavras-Chave:** heteroestruturas, Si, ressonância magnética

Heteroestruturas de Si/SiGe, crescidas por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) sobre substratos de Si(100), foram estudadas pela técnica de Ressonância Magnética Detectada Eletricamente (RMDE). Na técnica de RMDE, a ressonância de spin é detectada através de mudanças na condutividade da amostra. A técnica de RMDE apresenta uma sensibilidade muito superior à encontrada pela técnica de ressonância eletrônica de spin (RSE) convencional (em 7 ordens de grandeza), o que permite então o estudo de estruturas semicondutoras com dimensões reduzidas. A técnica é capaz de fornecer informações microscópicas sobre os processos envolvidos no transporte ou recombinação de portadores livres. No presente trabalho, amostras de Si/SiGe com alta mobilidade eletrônica ( $> 100.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  para  $T < 20\text{K}$ ) foram utilizadas. As amostras consistem de poços quânticos de Si tensionado, envolvidas por camadas de SiGe; em algumas amostras, um terceiro contato está presente permitindo a variação da densidade eletrônica no canal (MODFET). Para  $T < 50\text{K}$  no escuro, um sinal com um fator  $g \approx 2$  é observado, oriundo do gás eletrônico quasi-bi-dimensional. O sinal é extremamente dependente da mobilidade dos portadores (desaparecendo para  $\mu < 50.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ), além da densidade de portadores livres,  $n$ . Para  $n$  aumentando de  $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  para  $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , há um alargamento na forma de linha e um deslocamento no fator  $g$  de 1.9993 para 1.9988. Os dois efeitos estão relacionados a mudanças no acoplamento spin-órbita dos elétrons livres. Os espectros de RMDE são anisotrópicos com relação à direção do campo magnético, refletindo a anisotropia do fator  $g$  dos vales da banda de condução. Destas medidas  $\Delta g = g_{\perp} - g_{\parallel} \approx 9 \times 10^{-4}$ , em boa concordância com dados da literatura.

(ALEXANDER VON HUMBOLT STIFTUNG, FAPESP)

## ESTUDO DE BIRREFRINGÊNCIA E TRANSMITÂNCIA EM FERROFLUIDOS SUBMETIDOS A CAMPOS MAGNÉTICOS

*Luiz Cláudio Meira Belo, Ulisses Azevedo Leitão e Pedro Licínio*

Universidade Federal de Minas Gerais - Instituto de Ciências exatas - Departamento de Física

*Palavras-Chave: ferrofluido, birrefringência, transmitância.*

Descrevemos neste trabalho, estudos de birrefringência linear em ferrofluidos em presença de campos magnéticos externos, e estudos da variação temporal da transmitância com campo fixo. Os ferrofluidos são colóides formados por grãos magnéticos com dimensões típicas da ordem de 100Å, altamente susceptíveis à aplicação de campos magnéticos. Foram realizadas medidas de birrefringência em função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao vetor de onda da luz incidente. A precisão das medidas,  $\Delta n / n \cong 5 \times 10^{-5}$  com 256 pontos por varredura, possibilitou a discriminação de diferentes modelos de distribuição volumétrica. Foram testados três modelos: log-normal, monodispersivo e bidispersivo. Os dois primeiros modelos apresentaram ajustes ruins, enquanto que o terceiro apresentou um ótimo ajuste, indicando fortemente que o sistema apresenta uma polidispersão caracterizada por duas espécies dominantes. Medidas da intensidade de luz transmitida em função do tempo evidenciaram uma dinâmica de rearranjo estrutural extremamente lenta. Ao aplicarmos o campo magnético, para tempos curtos (da ordem de segundos) o valor da transmitância cai rapidamente para valores da ordem de zero e para tempos longos (da ordem de minutos a horas) observamos uma evolução caracterizada pelo aumento apreciável da transmitância. Ao retirarmos o campo externo, o sistema mostra uma relaxação temporal semelhante ao comportamento anterior, isto é, uma diminuição da transmitância em tempos curtos, chegando próxima de zero, e um aumento com tempos longos. A relaxação em campo nulo, embora semelhante à anterior em seu comportamento qualitativo, apresenta tempos característicos bem distintos. As amplitudes observadas e os tempos característicos dependem da história do sistema, levando-nos a considerar efeitos de *envelhecimento* ou *aging*. Este comportamento está sendo interpretado como indicativo da existência de um processo dinâmico de destruição de estruturas mesoscópicas imediatamente após a aplicação do campo magnético externo, seguida de um rearranjo estrutural em escalas de tempo longas.

## MEDIDAS ELÉTRICAS E DIELÉTRICAS EM ÓLEOS DA REGIÃO AMAZÔNICA

*Antônio Vitorino de Moraes*

Escola Técnica Federal do Pará, Belém,-Pa

*Petrus Agripino Alcântara Júnior e Sanclayton Geraldo Carneiro Moreira*

Universidade Federal do Pará, Campus do Guamá,

Centro de Ciências Exata e Naturais Belém-Pará.

A procura de materiais com propriedades interessantes para possível aplicação no mundo tecnológico está motivando uma quantidade grande de cientistas. É nesta filosofia que começamos a desenvolver o estudo de alguns óleos da região amazônica medindo determinadas propriedades elétricas e óticas.

Medimos a constante dielétrica de alguns óleos específicos da região amazônica (andiroba, copaiba, babaçu, dendê e buriti), com o interesse de conhecermos o comportamento de suas propriedades físicas, para possíveis aplicações no mundo tecnológico. Observamos também suas transições de fase (2ª ordem) para o estado sólido que ocorrem com a temperatura, obtendo as temperaturas de início e fim da transição bem como o comportamento da constante dielétrica para cada óleo antes, durante e depois da transição.

Desenvolvemos um sistema capaz de medir a constante dielétrica de um líquido onde a constante dielétrica é obtida a partir da razão entre os valores da capacitância de um capacitor plano, cheio e seco, usando-se como dielétrico o próprio óleo.

A presença de um campo elétrico DC nestes óleos gera por sua vez uma pequena corrente elétrica de alguns micro-amperes que têm um comportamento médio linear com a tensão aplicada. Dessas medidas foi possível se obter a rigidez dielétrica e a resistividade elétrica dos óleos que são características dos mesmos.

Os resultados, que são inéditos, nos permitiram classificar os referidos óleos em ordem de condutividade elétrica.

Observamos também o comportamento instantâneo da corrente elétrica produzida por uma tensão constante aplicada sobre os óleos e constatamos a presença de oscilações com picos bastante fortes, com frequência e amplitude não periódicas.

Apoio: Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação da UFPA.

## MODELO COLOIDAL DE UM FLUIDO MAGNÉTICO IÔNICO: UM ESTUDO CONDUTIMÉTRICO

*Francisco Augusto Tourinho<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>‡</sup> e Luiz Guilherme M. de Macedo<sup>†</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-chave: fluidos magnéticos, estabilidade de colóides, titulações condutométricas*

Nós chamamos de fluido magnético todo o líquido imantável. Trata-se de um novo material, constituído de pequenos grãos magnéticos em suspensão num líquido carreador, possuindo todas as propriedades de uma solução coloidal, nas quais se juntam propriedades magnéticas que dão origem a fenômenos totalmente inesperados, ricos de promessas técnicas. Portanto, o seu estudo é de interesse tanto no domínio da pesquisa fundamental, como no domínio da pesquisa aplicada. Parece haver um consenso de que é preciso reconsiderar vários conceitos físicos e físico-químicos e elaborar modelos magneto-coloidais, que descrevam de forma adequada as propriedades deste novo produto, que associa o magnetismo a um sistema coloidal. Ao contrário da química de soluções, onde as espécies estudadas são discretas e da química do estado sólido, que se interessa por compostos tridimensionalmente bem determinados, a caracterização de fluidos magnéticos trata de espécies mal definidas, apresentando numerosas dificuldades, onde é necessário a utilização de técnicas de análise de um destes domínios. Neste trabalho realizamos pela primeira vez estudos condutimétricos em fluidos magnéticos aquosos, o que nos permitiu elaborar um modelo coloidal que responde de forma satisfatória, tanto às condições de estabilidade do produto final quanto aos processos e operações físico-químicas empregados na sua elaboração. Assim, num fluido magnético iônico, a estabilidade coloidal é assegurada pela criação de uma densidade de carga elétrica superficial ajustável nas nanopartículas magnéticas que o constituem. A repulsão estabilizante, que se contrapõe às interações van der Waals e do tipo dipolo magnético, é criada graças a uma adsorção específica de grupos hidroxil anfotéricos e pode ser afetada por fenômenos de blindagem que dependem da concentração de íons estranhos na solução. Estes resultados são ajustados à luz de um modelo simples incluindo um mecanismo de carga-descarga nas partículas devido a mudanças na força iônica da solução.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE FLUIDOS MAGNÉTICOS DOPADOS

*Geraldo José da Silva<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>†</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>†</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: fluidos magnéticos, polidispersividade, ressonância magnética*

A Ressonância Paramagnética Eletrônica é introduzida como técnica de caracterização para a obtenção da polidispersividade em tamanho, do fluido magnético iônico à base de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ . Os parâmetros da polidispersividade, baseados numa distribuição log-normal  $f(R, R_0, *)$ , foram obtidos a partir da análise da forma da linha de ressonância do íon  $\text{Cu}^{2+}$  introduzido como dopante. A excelente concordância entre os dados obtidos das medidas de ressonância e os de microscopia eletrônica foram alcançados para um largo espectro de concentração do dopante. Um grupo de cinco amostras de fluidos magnéticos dopados foram obtidos usando soluções aquosas contendo  $\text{Cu}^{2+}$  a diferentes concentrações molares. O aumento da força iônica do fluido magnético devido ao  $\text{Cu}^{2+}$ , neste intervalo de concentração do íon, não comprometeu a estabilidade do fluido. As medidas de ressonância foram feitas a temperatura ambiente usando um espectrômetro de banda-X a uma frequência de 9,65 GHz. No intervalo de variação de campo magnético do nosso experimento não se observou ressonância da amostra não-dopada; uma característica de amostras com constante de anisotropia elevada. A excelente concordância entre os dados de ressonância magnética e o nosso modelo permitem que se obtenha parâmetros básicos, tais como a distância média entre as partículas, a magnetização, além daqueles que se referem a polidispersividade. O estabelecimento da ressonância magnética como uma técnica alternativa de caracterização da polidispersividade de amostras é um ponto importante a ser considerado no trabalho. A preparação da amostra é muito mais simples e o tempo de medida muito menor que no caso das técnicas de magnetização e microscopia eletrônica que são consideradas técnicas padrões.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## GEOMETRICAL ANISOTROPY DEPENDENCY OF THERMAL DIFFUSIVITY IN LYOTROPICS NEMATICS: MODE MISMATCHED THERMAL LENS MEASUREMENTS

*J. R. D. Pereira, E. C. da Silva, and A. M. Mansanares*  
*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP*  
*A. C. Bento, A. J. Palangana, L. R. Evangelista, and M. L. Baesso*  
*Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá*

**Key Word :** Thermal Lens Spectrometry (TLS), Liquid Crystal

Thermal Lens Spectrometry (TLS) is a transient technique which has been increasingly used to investigate the thermal transport properties of highly transparent materials. In this work, we have studied two lyotropic mixtures in their nematic calamitic phase by using the mode mismatched TLS configuration. In the experimental arrangement an Ar<sup>+</sup> laser was used as the excitation beam and a He-Ne as the probe beam. The sample thermal diffusivity was obtained from the curve fitting of the experimentally observed time profile of the developing thermal lens. The lyotropic mixtures investigated in this work were: 1) potassium laurate, decanol, water 2) potassium laurate, potassium chloride, water. The axes of the directors in the nematic phases were aligned for some hours in a magnetic field 0.8 T for both orientations, parallel and perpendicular to the side walls. The curve fitting gave the thermal diffusivity  $\alpha_{||} = 171 \pm 0.01 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  for mixture-1 and  $\alpha_{||} = 131 \pm 0.01 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  for mixture-2.

The ratios between the thermal diffusivity parallel and perpendicular were found to be 1.2 for both mixtures. The physical behavior of this system can be tentatively understood if we consider the sample as an array of thermal resistors of rod-like shape. It is possible to show that, the maximum anisotropy in the thermal conductivity,  $k$ , obeys the relations  $k_{||}/k_{\perp} = \alpha_{||}/\alpha_{\perp} \cong L/D$ ,  $L$  and  $D$  being the length and the diameter of the micelles. Taking the ratio  $L/D = 1.6$  (from the literature) we found  $\alpha_{||}/\alpha_{\perp} = 1.3$  which is very close to our experimental results. In conclusion, by using TLS, the anisotropic thermal diffusivity of two different mixtures of lyotropic nematic Liquid Crystal were determined. We have proposed a simple model which associate the thermal diffusivity anisotropy with the form of the micelles.

CNPQ, FAPESP

## UTILIZAÇÃO DE SONDA PARAMAGNÉTICA ULTRA-ESTÁVEL PARA CARACTERIZAÇÃO DE FLUIDOS MAGNÉTICOS

*Osni Silva\**

*Paulo Cezar de Moraes'*

*Francisco Augusto Tourinho''*

- \* Departamento de Física - UFG, 74001-970 - GOIÂNIA - GO
- ' Departamento de Física - UNB, 70910-900 - BRASÍLIA - DF
- '' Departamento de Química - UNB, 70910-900 - BRASÍLIA - DF

**Palavras-Chaves:** fluidos magnéticos, ressonância magnética, dopagem

A técnica de ressonância magnética tem sido utilizada com sucesso na caracterização e no estudo de propriedades físicas e físico-químicas de fluidos magnéticos. Entretanto, os trabalhos têm se concentrado no sinal de ressonância das próprias nanopartículas magnéticas, em suspensão coloidal no fluido magnético. Além disso as medidas têm sido realizadas em campo externo não nulo, em geral em frequências da ordem de 9 Ghz, limitando-se portanto a materiais com valores de anisotropia magnetocristalina de moderada a fraca. Tais condições de ressonância não são adequadas para estudar materiais que apresentam anisotropia magnetocristalina elevadas, a exemplo do fluido magnéticos à base de partículas de ferritas de cobalto. A solução alternativa, recentemente proposta, baseia-se na dopagem do fluido magnético com sondas paramagnéticas bem conhecidas e dispersas no líquido carreador. A sonda  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  tem sido utilizado com sucesso em fluidos magnéticos iônicos ácidos. Entretanto, a mesma sonda não pode ser utilizada em fluidos iônicos básicos. O presente trabalho propõe a utilização de uma sonda paramagnética complexada por agente complexante de alta estabilidade. Tal sonda permite variações das concentrações de  $\text{H}^+$  e  $\text{OH}^-$  em várias ordens de magnitude sem perda da identidade da sonda paramagnética. As medidas de ressonância em fluidos magnéticos dopados com centros paramagnéticos permitem determinar, por exemplo, a polidispersidade da amostra e a constante de anisotropia magnetocristalina. A polidispersidade do fluido magnético, tradicionalmente determinada por microscopia eletrônica, pode ser obtida a partir da análise da forma de linha de ressonância magnética do dopante, mesmo a temperatura ambiente. A constante de anisotropia magnetocristalina do fluido magnético pode ser obtida por medidas de variação angular do campo de ressonância do dopante.

Apoio: CNPq, FAP-DF, PADCT, CAPES

## MAGNETIC PARTICLE-PARTICLE INTERACTION IN SINGLE PARTICLE SYSTEMS AND AGGLOMERATES

*Maria Cristina Figueiredo L. e Lara<sup>1</sup>, Paulo Cesar de Morais<sup>1</sup> and Francisco Augusto Tourinho<sup>2</sup>*  
Universidade de Brasília, <sup>1</sup>Departamento de Física -<sup>2</sup>Departamento de Química- DF

*Palavras - Chave: magnetic fluids, magnetic agglomerates, magnetic resonance*

Magnetic resonance is used to investigate magnetic interaction in magnetic fluids and magnetic agglomerates. Magnetic dipole-dipole interaction between monodomain particles accounts for the magnetic resonance behavior in magnetic fluids. In magnetic agglomerates however an anisotropic interaction between spins in the agglomerate and spins in the magnetic monodomain dominates the magnetic resonance behavior. A magnetic single particle system is performed by magnetic fluids where monodomain nanoscaled magnetic particles are dispersed in a carrier fluid. For decades intensive investigations have been performed in both magnetic fluids and magnetic agglomerates (fine particle systems). However, little effort has been done to understand the relationship between the magnetic properties of single particle systems (magnetic fluids) and the corresponding magnetic agglomerates. Frozen magnetic fluids have recently attracted some attention particularly because magnetic glass-like behavior has been associated with magnetic dipole-dipole interaction. In the present work we focus our attention at the temperature dependence of the magnetic resonance linewidth in both, frozen magnetic fluid and the corresponding powder sample. Magnetic resonance is used here to study the temperature dependence of the resonance linewidth broadening in two different but related systems - the magnetic fluid and its related powder composed of magnetic agglomerates. The temperature dependence of the magnetic resonance linewidth is very different from one sample (single particle system) as compared to the other (magnetic agglomerate). In fact as the magnetic particles stick together in a magnetic agglomerate a quenching of the resonance linewidth broadening is observed. Such a quenching effect is claimed to be due to the onset of a new relaxation channel, via spin waves, which could be orders of magnitude faster than the channel (dipole-dipole interaction) observed in magnetic fluid samples.

( FAPDF, PADCT and CNPq )

## COMPORTAMENTO TERMO-DINÂMICO-MECÂNICO DE BLENDAS ELASTOMÉRICAS DE POLIANILINA

*Gerson L. Mantovani<sup>1</sup> e Luiz H.C. Mattoso<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Universidade Federal de São Carlos/UFSCar-DEMa,

<sup>2</sup>Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária/EMBRAPA-CNPDIA

**Palavras-Chave:** polímeros condutores, polianilinas, blendas.

A condutividade elétrica é uma propriedade de grande interesse tecnológico para o uso de elastômeros termoplásticos em aplicações como tintas anticorrosivas e adesivos condutores. Neste trabalho nós tivemos êxito na preparação, por solução, de blendas condutoras elétricas de polianilinas e copolímero de estireno-etileno/butileno-estireno (SEBS). Estes materiais foram obtidos na forma de filmes que possuem elasticidade da borracha SEBS e condutividade muito próxima ao do polímero condutor. É interessante notar que as condições de preparação (dopante, elastômero e solvente) tem um efeito marcante na condutividade elétrica e no comportamento mecânico da blenda. Blendas contendo apenas 2,5% de polianilina dopada com ácido cânforssulfônico (SEBS/PAni-CSA-2,5%) alcançaram condutividade de até 5 S/cm. Estas blendas foram investigadas por análise termo-dinâmico-mecânico (DMTA), calorimetria diferencial de varredura (DSC), análise termo-gravimétrica (TGA) e ensaio de tração (Instron). A temperatura de transição vítrea (T<sub>g</sub>) da fase borrachosa do SEBS ( $\cong -45^{\circ}\text{C}$ ), assim como a elongação nos ensaios de tração ( $\cong 700\%$ ) se manteve praticamente inalterada na blenda, consistente com o comportamento borrachoso observado para as blendas SEBS/PAni-CSA-2,5%. Com relação aos domínios de poliestireno do elastômero, observa-se uma diminuição de cerca de 15 °C no T<sub>g</sub> e um decréscimo no módulo de armazenamento ( $\epsilon'$ ) de 308 MPa para 224 MPa, à 25 °C, com a formação da blenda. Um efeito similar foi observado na resistência à ruptura nos ensaios de tração. A análise térmica por TGA demonstrou que estas blendas suportam temperaturas superiores a temperatura de processamento do SEBS sem praticamente sofrer perda de massa.

(FAPESP, CAPES e CNPq)

## ANÁLISE QUIMIOMÉTRICA DOS FATORES DE SÍNTESE ELETROQUÍMICA DETERMINANTES DA CONDUTIVIDADE DO POLIPIRROL

*Francisco Luiz dos Santos, Celso Pinto de Melo*

Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco

*José Edson Gomes de Souza e Benício de Barros Neto*

Departamento de Química Fundamental - Universidade Federal de Pernambuco

**Palavras-Chave:** condutividade, polipirrol, quimiometria

Embora seja bem sabido que a condutividade de filmes de polipirrol dopado é extremamente sensível às condições de síntese, estudos dos fatores (variáveis passíveis de controle) de síntese eletroquímica têm sido normalmente feitos de forma isolada para cada fator. O fato das propriedades de transporte de uma amostra de polímero condutor serem altamente dependentes do modo de preparação nos levou a um estudo quimiométrico mais amplo que nos permitisse uma análise quantitativa da influência das condições de síntese de polipirrol sobre a condutividade das amostras produzidas. Neste trabalho são apresentados resultados de uma investigação baseada no planejamento fatorial 2<sup>4</sup> da influência de fatores como a concentração do dopante (ácido *p*-tolueno sulfônico) na solução eletrolítica, temperatura do banho térmico, densidade de corrente e tempo de síntese sobre a condutividade de filmes de polipirrol. Para cada um dos fatores foram adotados dois níveis de valores e o planejamento fatorial completo foi feito em duplicata. O cálculo dos efeitos principais dá um indicativo de que os fatores concentração do dopante e densidade de corrente são os que mais influenciam a condutividade dos filmes resultantes. Um resultado inesperado foi a presença de grandes efeitos de interação, até mesmo entre fatores isoladamente pouco significativos. As fortes interações observadas entre esses fatores podem se dever à ligação das variáveis diretamente controladas com parâmetros não estudados, por exemplo, aquelas correlacionados com a cinética de reação de polimerização. O presente estudo está sendo estendido para permitir uma mais completa varredura da superfície de resposta da condutividade do polipirrol com outros níveis dos fatores eletroquímicos.

(Apoio CNPQ, FINEP, FACEPE)

## DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS TÉRMICOS DA POLIANILINA POR ESPECTROSCOPIA FOTOPIROELÉTRICA

*José Eduardo de Albuquerque*  
*Departamento de Física/UFV/Viçosa-MG*

*Washington Luiz de Barros Melo*  
*DEE/UNESP/Ilha Solteira-SP*

*Roberto Mendonça Faria*  
*DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP*

**Palavras-chave:** polianilina, espectroscopia fotopiroelétrica, propriedades térmicas

As transições eletrônicas em polianilinas (PANI) não-dopadas e protonadas definem os mecanismos de condução elétrica ao longo de suas cadeias moleculares. Nesse trabalho, mostramos que essas bandas de absorção podem ainda, por meio de processos fototérmicos, ser uma ferramenta útil para a obtenção de parâmetros térmicos do material, como a difusividade e a condutividade térmicas. Realizamos inúmeras medidas espectroscópicas e de sinal fotopiroelétrico versus frequência de modulação da luz em filmes de PANI não-dopados, e dopados em meios ácidos de diferentes valores de pH. Usamos o modelo de Mandelis baseado nas equações de difusão de calor na condição de detector termicamente espesso para o ajuste teórico-experimental. A difusividade térmica variou de  $1,32 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ , para a PANI não-dopada, até  $1,82 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  para a dopada em pH próximo de zero, e a condutividade térmica de  $1,94 \times 10^{-4}$  a  $2,16 \times 10^{-4} \text{ cal/cm s K}$ . O calor específico, que em processo transiente é obtido diretamente das grandezas condutividade e difusividade térmicas e da densidade do material, praticamente não varia com o estado de dopagem do polímero, ficando sempre em torno de  $0,1 \text{ cal/g K}$ .

(CAPES)

## TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE EM PASTILHAS Prensadas DE POLI (3-METILTIOFENO) DOPADAS COM $\text{BF}_4^-$ E FORMAÇÃO DE BIPOLARONS.

*O.R. Nascimento<sup>(1)</sup>, E.C. Pereira<sup>(2)</sup>, L.O.S. Bulhões<sup>(2)</sup>, A. Pawlicka<sup>(3)</sup> e L. Walmsley<sup>(4)</sup>*

(1) Dpto de Física e Informática, I.Física, USP, C.P. 369, CEP 13560-970, S. Carlos, S.P.

(2) Dpto de Química, UFSCar, C.P. 676, CEP 13565-970, S. Carlos, S.P.

(3) Dpto de Físico-Química, I. Q., USP, C.P. 780 CEP 13560-970, S. Carlos, S.P.

(4) Dpto de Física, IGCE, UNESP, C.P. 178, CEP 13500-970, Rio Claro, S.P.

**Palavras-Chave:** polímeros condutores, ressonância paramagnética eletrônica, transições.

Em trabalhos anteriores mostramos que a técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) é muito útil para se obter informações sobre propriedades elétricas em polímeros condutores. Neste trabalho apresentamos os resultados de medidas de RPE em pastilhas prensadas de poli(3-metiltiofeno) (P3MT) dopadas com  $\text{BF}_4^-$ , na faixa de temperatura de 230K a 330K. Poli(3-metiltiofeno) foi sintetizado eletroquimicamente em substratos de prata, a um potencial constante de 1,5V a partir de uma solução de acetonitrila contendo 0,1M de metiltiofeno e saturada com  $\text{NaBF}_4$ . Medidas de RPE foram realizadas num espectrometro de reflexão Varian E-109 em banda X, com uma cavidade retangular  $\text{TE}_{102}$  adaptada a um sistema de fluxo de nitrogênio. Medidas realizadas subindo a temperatura entre 293K e 333K mostraram que em torno de 310K a susceptibilidade paramagnética que estava constante passa a decrescer indicando uma transição para um estado localizado com susceptibilidade tipo Curie, portanto indicando uma transição metal-isolante. Abaixo de 293K a susceptibilidade paramagnética se mantém constante até 230K, mostrando que o estado metálico se mantém até essa temperatura. Na faixa entre 230K e 293K a condutividade (GHz) também se mantém constante, o que é, indicativo de estado metálico. Acima de 293K a condutividade começa a aumentar com o aumento da temperatura, compartimento este indicativo de hopping entre estados localizados. Diferentemente da subida entre 293K e 333K, a descida nessa faixa de temperatura mostra valores de condutividade maiores para as mesmas temperaturas na subida. Os valores de susceptibilidade paramagnética são menores que para as mesmas na subida. Uma possível explicação é que bipolarons foram criados pelo tratamento térmico a essas temperaturas.

## ESTUDO DO COPOLIMERO POLY(EPICLORIDRINA-OXIDO DE ETILENO) DOPADO COM LiClO<sub>4</sub>

*A.E. Wolfenson, R.M. Torresi<sup>†</sup>, T.J. Bonagamba, M.A. De Paoli<sup>‡</sup> and H. Panepucci*

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, C.P. 369, 13560-970 São Carlos(SP)

<sup>†</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, C.P. 780, 13560-970 São Carlos (SP)

<sup>‡</sup>Instituto de Química, UNICAMP, Caixa Postal 6154, 13083-970 Campinas (SP)

*palavras-chave:* polimeros, NMR, conductividade

Neste trabalho se apresenta o estudo do copolímero Poli(epicloridrina- óxido de etileno) (PEPI-POE) dopado com LiClO<sub>4</sub>. O objetivo é analisar como é afetada as características do polímero e sua dinâmica quando dissolvem-se em ele as sais para su dopado; assim também como são as interações entre o polímero, sal e solvente utilizado para a preparação das amostras. Foram estudadas três diferentes grupos de amostras os quais diferem no solvente e processo térmico utilizado em sua preparação. As propriedades condutoras das amostras foram caracterizadas a partir de experimentos de Impedância Faradaica. A caracterização estrutural foi realizada mediante o análise dos espectros de RMN de <sup>13</sup>C e estudos da dependência da largura da linha de ressonância do <sup>7</sup>Li com a temperatura e o conteúdo de Li<sup>+</sup> das amostras.

Dos espectros de RMN de <sup>13</sup>C das amostras é evidente que apos do processo de dopado fica solvente dentro da matriz polimérica, sendo a quantidade de solvente dependente da concentração de Li<sup>+</sup> da solução sólida. Além disso, existe uma grande diferença entre o comportamento de tetrahydrofurane (THF) e acetona dentro do eletrolito sólido. No caso de THF o solvente interatua principalmente com a cadeia polimérica e a acetona interatua fundamentalmente com a sal iônica. Para altas concentrações de Li<sup>+</sup> é importante o conteúdo de solvente dentro da matriz polimérica o qual atua como plastificante. O efeito plastificante do solvente origina um incremento na mobilidade da cadeia polimérica gerando um incremento na condutividade das amostras.

Dos estudos realizados se concluiu que o copolímero PEPI-PEO é muito adequado para a solvatação das sais de Li, pois se combina efetivamente com os cations da sal, formando uma solução sólida. As medidas de condutividade evidenciam que o copolímero PEPI-PEO dopado com LiClO<sub>4</sub> é um bom condutor iônico a temperatura ambiente. (FAPESP, CAPES, CNPq e FINEP)

## STUDY AND MECHANISMS OF STEREOLITHOGRAPHY IN THERMOSENSITIVE MATERIALS USING CO<sub>2</sub> LASER

*P.R.S. Wagner, A.L.J. Munhoz, M.C.F. Ierardi, Z. Zhiyao<sup>+</sup>, B. Shuheng<sup>+</sup>, M.A.F. Scarparo<sup>\*</sup>*

Department of Materials - Mechanical Engineering Faculty -UNICAMP

<sup>+</sup> - Shangai Institute of Optics and Fine Mechanisms - Academia Sinica

<sup>\*</sup> - Quantum Eletronic Department - Intitute of Physics - UNICAMP

*Key-Word:* infrared laser, thermal curing, thermosensitive materials

We present in this paper the use of infrared laser radiation to achieve localized curing in thermosensitive epoxy resin compounds. In stereolithography the objective is to cure a localized region in a material by precisely confining the laser energy to the area that is to be cured. Industry already employs high-power ultraviolet laser radiation at 352nm to fabricate three dimensional structures. Via UV photochemical curing we demonstrate the viability of a completely thermal localized curing process. In our experiment, we have focused the beam from a carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) laser onto a sample composed of epoxy resin, diethylene triamine, and silica powder. Such resins typically cure, or solidify, when heated to moderately high temperatures and ours results show that we can confine the heating of the material, and, therefore, its curing, in all three dimensions. We present a physical and a chemical model to describe the process, and measure the curing rate as a function of temperature. In order to model the flow of heat in our sample as a result of infrared laser irradiation we solved the time-dependent heat equation in cylindrical coordinates using the Crank-Nicholson finite-difference method. The results allow us to predict the curing behavior of the sample as a function of laser irradiation conditions, and we find good agreement with our preliminary experimental observations. Prototypes has been constructed layer by layer. Experimental results of the production of solid layers of thikness 10<sup>-1</sup> - 10<sup>-2</sup> mm in one, two and three dimensions are presented.

## SÍNTESE DE FILME FINO DA FASE SUPERCONDUTOR $YBa_2Cu_4O_8$ , VIA ELETRODEPOSIÇÃO .

*Antonio Jefferson da Silva Machado, Carlos Alberto Moreira dos Santos, Alain Robin*  
Grupo de supercondutividade, Departamento de Engenharia de Materiais, FAENQUIL  
12.600-000 Lorena-SP

*Sergio Moehlecke*  
Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade de Campinas, UNICAMP  
13.083-970 CAMPINAS - SP

*Palavras-Chave:* supercondutividade, filme fino, eletrodeposição.

A síntese de filmes finos supercondutores dos sistemas Bi(Pb)-Sr-Ca-Cu-O, Bi-Sr-Ca-Cu-O, Tl-Ba-Cu-O, Sm-Ca-Cu-O, Y-123, etc., pela rota de eletrodeposição a potencial constante, tem sido investigada por alguns grupos. Esta rota apresenta algumas vantagens quando comparada com outras técnicas de produção de filmes, como por exemplo custo, simplicidade dos equipamentos e principalmente a possibilidade de se produzir filmes com qualquer geometria. No entanto a produção de filmes da fase  $YBa_2Cu_4O_8$ , só tem sido investigada por outras técnicas, sem no entanto apresentar fase única. Neste trabalho mostraremos resultados que comprovam a existência de fase única de  $YBa_2Cu_4O_8$ , em filmes finos, produzidos pela rota de eletrodeposição. Para tanto serão mostrados resultados de difração de raios-x, microscopia eletrônica de varredura, resistividade em função da temperatura, curvas de corrente em função do potencial de deposição do material e finalmente curvas de composição do depósito em função da concentração dos precursores no banho de DMSO.

## TRANSIÇÃO RESISTIVA E FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DE FILMES FINOS SUPERCONDUTORES EPITAXIAIS $RBa_2Cu_3O_{7.5}$ ( $R=Y, Ho, Gd$ ) CRESCIDOS POR "IN-SITU" SPUTTERING DC

*J. Roa-Rojas<sup>(a)</sup>, P. Prieto<sup>(b)</sup> e P. Pureur<sup>(a)</sup>*

*(a)* Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS

*(b)* Departamento de Física, Universidad del Valle, Santiago de Cali, Colômbia

*Palavras-Chave:* supercondutividade, filmes-finos, flutuações

A técnica de sputtering *dc* em altas pressões de oxigênio foi utilizada para o crescimento *in-situ* de filmes finos supercondutores epitaxiais de  $YBa_2Cu_3O_{7.5}$ ,  $GdBa_2Cu_3O_{7.5}$  (3000 Å de espessura) e  $HoBa_2Cu_3O_{7.5}$  (2500 Å de espessura). Para obter filmes finos de alta qualidade é necessário otimizar vários parâmetros interdependentes, muito correlacionados com as propriedades supercondutoras do filme. O sputtering é feito em alvos policristalinos com estequiometria  $RBa_2Cu_3O_{7.5}$ , preparados por reação de estado sólido, situados em um cátodo de Cu esfriado com água, e a deposição é feita sobre substratos monocristalinos de  $SrTiO_3$  orientados segundo o eixo (100), colocados sobre um aquecedor de aço puro à distância adequada do alvo e com temperatura ligeiramente inferior à temperatura de sinterização do alvo. Neste trabalho discutimos as características do sistema de crescimento dos filmes e a técnica de otimização dos parâmetros: composição e pressão do gás sputtering, corrente e voltagem para a ocorrência do plasma, distância alvo-substrato, temperatura do substrato, taxa de deposição e dimensões do alvo. Apresentamos resultados de R-X nos quais a perfeita disposição epitaxial dos filmes é demonstrada. Discutimos a transição resistiva que ocorre em  $T_c \approx 90$  K e tem largura  $\Delta T_c \approx 1,0$  K; a razão entre a resistividade a temperatura ambiente e em 100 K alcança valores da ordem de  $RRR \sim 1,7$  a 3,0. Por fim, apresentamos e discutimos resultados de flutuações nas propriedades de magnetotransporte destes sistemas onde evidenciam-se os efeitos da substituição de Y pelas terras raras magnéticas Ho e Gd.

(Colciencias, CNPq)

## INTER-GRANULAR TRANSITION IN $GdBa_2Cu_3O_7$

I. Abrego Castillo<sup>a</sup>, L. M. R. Oliveira<sup>a</sup>, R. A. Penno Filho<sup>a</sup>, J. R. Rojas<sup>b</sup>, A. R. Jurelo<sup>b</sup>,  
P. Pureur<sup>b</sup> and L. Ghivelder<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física - UFRJ, c.p. 68528, Rio de Janeiro, RJ, 21945-970

<sup>b</sup> Instituto de Física - UFRGS, c.p. 15051, Porto-Alegre, RS, 91501-970

**Key-words:** Inter-granular transition, superconductivity

We present measurements of electrical resistivity, specific heat and AC susceptibility in a ceramic sample of  $GdBa_2Cu_3O_7$ . Electrical resistivity was measured with a standard four points technique, and a superconducting resistive transition is observed at  $T_c = 94.5$  K. The temperature derivative of the resistivity shows two distinct peaks, associated with the intra- and inter-granular transitions. A detailed analysis of fluctuations in the conductivity is presented elsewhere [1]. Specific heat measurements were carried out from 10 to 200 K, using an adiabatic pulse technique. The aim of these measurements is to look for a contribution from the inter-granular transition in the specific heat of a superconducting oxide. An anomaly is observed at  $T_c = 94.5$  K, with a specific heat jump  $\Delta C/T_c \cong 70$  mJ/g K<sup>2</sup>, which represents 3.5% of the total specific heat. A small step is also observed in the middle of the calorimetric transition. Although the magnitude of the step is very small, close to the resolution of the experimental apparatus, this feature is reproducible within several different runs. The double step structure of the transition is clearly identified in the temperature derivative of the specific heat, where the intra- and inter-granular contributions are resolved, and separated by 1.5 K, the same spacing obtain in resistivity measurements. Results of AC susceptibility also shows a double character in the superconducting transition, as observed in the imaginary part of the susceptibility. The nature of the inter-granular transition in ceramic superconductors have been the subject of numerous publications. However, several authors have suggested that the occurrence of a double superconducting transition is a consequence of a non-homogenous distribution of oxygen content in the grains.

[1]. J. R. Rojas, A. R. Jurelo and P. Pureur, this conference.

## FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO $YBa_2Cu_3O_7$ MONOCRISTALINO NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO

R. M. Costa <sup>(a)</sup>, P. Pureur <sup>(a)</sup>, S. Senoussi <sup>(b)</sup>, K. Behnia <sup>(b)</sup>, L. Taillefer <sup>(c)</sup> and R. Gagnon <sup>(c)</sup>

<sup>(a)</sup> Instituto de Física, UFRGS, Caixa Postal 15051, 91501-970 Porto Alegre, Brasil

<sup>(b)</sup> Laboratoire de Physique des Solides, Université de Paris-Sud 91405, Orsay, France

<sup>(c)</sup> Department of Physics, McGill University, 3600 University Street, Québec, Canada

**Palavras-Chave:** supercondutividade, flutuações, magnetocondutividade

Através da determinação experimental da derivada logarítmica da condutividade em função da temperatura, estudamos os regimes de flutuações críticas e gaussianas nas proximidades da transição normal/supercondutora do  $YBa_2Cu_3O_7$  monocristalino, na presença de campo magnético. Campos Magnéticos desde 10 G até 14 T foram aplicados nas direções paralela e perpendicular aos planos de cobre e oxigênio ( $CuO_2$ ). A corrente de excitação foi aplicada na direção paralela aos planos de cobre e oxigênio. A partir dos resultados obtidos estudamos a estabilidade do espectro de flutuações e construímos diagramas de fase H-T correspondentes às três diferentes configurações de campo magnético/corrente de excitação. Os diagramas de fase mostram as regiões de validade do regime crítico XY-3D e do regime gaussiano (3D, 2D, 1D) de flutuações. Os intervalos de temperatura e campo magnético dominados por flutuações do tipo LLL (lowest Landau level) são também evidenciados e discutidos. Muito próximo a  $T_c$  e em campos magnéticos fracos foram identificados novos regimes de scaling. Os expoentes relacionados a estes novos regimes podem ser interpretados como evidência do caráter não convencional da supercondutividade neste sistema. A partir de 5000 G, nas configurações de campo magnético aplicado perpendicularmente à corrente de excitação, a análise da derivada numérica da resistência em função da temperatura mostra o aparecimento de picos na região de temperaturas inferiores a temperatura crítica ( $T_c$ ). Estes picos estão relacionados à dinâmica de vórtices indicando as sucessivas perdas de correlação translacional do sólido de vórtices nas direções longitudinal e transversal ao campo magnético aplicado.

(CNPq, CAPES)

## FLUTUAÇÕES NA MAGNETOCONDUTIVIDADE DE BAIXO CAMPO NO $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ : REGIMES CRÍTICO, GAUSSIANO E LLL

R. Menegotto Costa<sup>(a)</sup>, P. Pureur<sup>(a)</sup>, L. Ghivelder<sup>(b)</sup>, J. A. Campá<sup>(c)</sup> e I. Raşines<sup>(d)</sup>

<sup>(a)</sup>Instituto de Física, UFRGS, C.P. 15051, 91501-970, Porto Alegre, Brasil

<sup>(b)</sup>Instituto de Física, UFRJ, C.P. 68528, 21945-970, Rio de Janeiro, Brasil

<sup>(c)</sup>Facultad de Ciencias Geológicas, USM, 28040 Madrid, Espanha

<sup>(d)</sup>Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC, Serrano 113, 28006, Madrid, Espanha

*Palavras-Chave:* supercondutividade, flutuações, monocristais

Nós apresentamos uma série de medidas da transição magnetocondutiva num monocristal de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ . As experiências são feitas aplicando-se a corrente numa direção paralela aos planos atômicos Cu-O, ao passo que vários campos magnéticos, entre 0 e 200 Oe, foram aplicados tanto paralela quanto perpendicularmente à direção da corrente. Ambas as orientações perpendiculares (campo aplicado ao longo do eixo-c e paralelo ao plano) foram estudadas. Para campos muito baixos e num intervalo de temperaturas da ordem de 0.1 K acima de  $T_c$ , nós identificamos a ocorrência de um regime de flutuações na magnetocondutividade com o expoente típico da termodinâmica dos sistemas XY-3D. Nossos resultados permitem estudar a estabilidade deste regime genuinamente crítico em função da magnitude e orientação do campo aplicado, bem como seu relacionamento com o scaling tipo 'lowest Landau level' (LLL) que prevalece em campos elevados. Os regimes Gaussiano bi- e tridimensionais, observados sequencialmente a medida que a temperatura é elevada acima de  $T_c$ , são pouco afetados pelo campo no intervalo estudado. O conjunto dos resultados permite a derivação de diagramas de fase H-T para as diferentes configurações de campo-corrente, onde as regiões de validade dos regimes crítico, LLL e Gaussiano são delimitadas.

## EFEITOS RESISTIVOS SOBRE A SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA DE CERÂMICAS SUPERCONDUTORAS DO TIPO $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ .

O.F.Schilling<sup>1</sup>, I. Abrego Castillo<sup>2</sup>, e L. Ghivelder<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, UFSC, Florianópolis, SC

<sup>2</sup> Instituto de Física, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

*Palavras-Chave:* supercondutividade, magnetismo, cerâmica.

A medição de suscetibilidade magnética AC ( $\chi = \chi' + i\chi''$ ) tem sido extensivamente utilizada como ferramenta no estudo de supercondutores cerâmicos. Admitindo-se que a resposta magnética das amostras possa ser representada por uma média ponderada das contribuições dos grãos supercondutores e do material intergranular, tais medidas permitem determinar a fração supercondutora, e as densidades de correntes que circulam pelo material, entre outras propriedades. Quando o aprisionamento das linhas de vortex é forte, desprezam-se efeitos resistivos devidos ao escoamento viscoso e/ou termicamente ativado de vórtices, e emprega-se o modelo de estado-crítico na análise. Isto resulta em uma suscetibilidade independente da frequência excitadora. Na prática, entretanto, verificam-se deslocamentos nas curvas obtidas por susceptometria, à medida que varia-se a frequência do campo excitador. Neste trabalho analisamos tais deslocamentos com um modelo de dois fluidos (normal e supercondutor) para os portadores de cargas. Levam-se em conta efeitos resistivos do transporte de corrente normal intergranular, superposta à corrente supercondutora. Resolvem-se simultaneamente as equações de Ampere e Faraday para a transformadas de Fourier da densidade de fluxo numa amostra cilíndrica, sendo obtida a suscetibilidade teórica. O modelo é comparado com resultados experimentais obtidos para uma cerâmica tipo  $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$  (YBCO). Verifica-se que o deslocamento do pico da curva de  $\chi''$  contra a amplitude do campo excitador  $h_0$ , em função da frequência é reproduzido pelo modelo, com valores realistas da resistividade da amostra.

(CNPq, FINEP, CAPES)

## MECHANIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF TIN-HARD COATINGS COMPOUNDS

*Thomas Hirsch and P. Mayr*

Stiftung Institut für Werkstofftechnik, 28259, Bremen, Bad Gasteiner Str. 3, Germany

*Palavras-Chave:* coatings, tribology, films

The performance of tools and components in an tribological, corrosive or mechanical loaded environment is especially determined by the properties of near surface layers. To guarantee the performance of tools a broad variety of different hard coatings are used in industry. A considerable increase in the lifetime of tools or tribological systems can be obtained in many cases. However, investigations are known in which a hard coating did not act towards a positive result even if an otherwise reliable coating system was applied. Frequently pronounced scatter in lifetime results of coated tool or components is observed.

To minimise these well known problems more than all the coating systems and equipment has been optimised. Less attention was paid to the fact that the machining induced properties of the substrate are of great significance well for the functionality of the hard coating composite tools and components. Aside the chemical composition of the tool materials all machining operations, including the heat treatment, will affect the microstructural and residual stress state, the topography and a possible contamination of the surface.

According to this paper we will present an overview over the microstructure and properties of the coating itself as far as this is necessary for the understanding of the properties of the hard coated composite. For that purpose results of metallographic examinations are summarised as well as the multiple results of microstructural investigations by x-ray diffraction measurements. Following characteristic own results as well as examinations of the literature related to the properties and performance of the hard coating composite will be discussed. Among these the machining induced properties of the substrate will be assessed in relation to the performance of the coated composite.

## NITRETOS de Ti-6Al-4V: PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO

R. Hübler<sup>A,B</sup>, S.R. Teixeira<sup>A</sup>, M.A.Z. Vasconcellos<sup>A</sup>, C.A. dos Santos<sup>A</sup>, M. Soares<sup>A</sup>,  
M. Fujiwara<sup>C</sup>, E. Kamijo<sup>C</sup>

(A) Instituto de Física da UFRGS CP.15051 - 91501-970 - Porto Alegre - RS

(B) Instituto de Física da PUCRS

(C) Faculty of Science and Tech. - Ryukoku University - Japan

As ligas de titânio possuem grande aplicação industrial desde revestimentos protetores contra corrosão e desgaste mecânico até implantes e próteses usados em seres humanos. A liga Ti-6Al-4V (90 at% de titânio, 6 at% de alumínio e 4 at% de vanádio) apesar de ter propriedades eletroquímicas mais estáveis que o titânio puro, apresenta problemas de desgaste e corrosão com o passar do tempo ocasionando a perda da peça ou prótese.

O objetivo deste trabalho é obter filmes finos do nitreto estequiométrico da liga (Ti-6Al-4V)N e pesquisar se existe uma melhora nas propriedades eletroquímicas e mecânicas como ocorre com o nitreto de titânio (TiN). Os filmes são depositados por magnetron sputtering (MS) e por dual ion beam sputtering (DIBS), variando-se as condições de deposição como pressão parcial de nitrogênio no caso de MS e a energia dos íons no DIBS. As técnicas de análise usadas para determinar o processo de crescimento e formação de fases dos filmes finos foi: difração de raios-X (XRD), análise por microsonda (EDS e WDS), análise de fotoelétrons emitidos (XPS), microdureza e retroespalhamento de Rutherford RBS.

Os resultados obtidos mostram que as propriedades mecânicas dos filmes, tais como dureza e a cor variam fortemente com os parâmetros de deposição, indicando um comportamento similar ao encontrado para o TiN.

## CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE NITRETO DE CARBONO AMORFO.

*Mônica de Mesquita Lacerda, Dante Ferreira Franceschini, Fernando Lázaro Freire Jr.*

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

*Carlos Alberto Achete*

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais-COPPE-UFRJ – RJ

**Palavras-Chave:** carbono, filmes, nitretos

Estudos da deposição de filmes finos de nitreto de carbono amorfo utilizando a técnica de erosão catódica ("RF Sputtering") foram realizados. As amostras foram depositadas em substratos de Si, em atmosferas de  $N_2+Ar$ , com pressões totais de 2 Pa e 8 Pa, tendo a pressão parcial de nitrogênio ( $P_{N_2}$ ) variado entre 0% e 100%. O substrato foi mantido à temperatura ambiente e a potência de RF mantida a 150 W. Os filmes foram analisados através de técnicas nucleares (Rutherford Backscattering Spectrometry - RBS, e Reação Nuclear), e de espectroscopias Raman e de Infra-Vermelho (IR). As medidas de espessura foram feitas usando um perfilômetro DEKTAK II. A taxa de deposição dos filmes aumenta em função da pressão parcial de nitrogênio. A quantidade de nitrogênio incorporada à rede de carbono é da ordem de 42 at% e independe de  $P_{N_2}$ . Medidas de tensão mecânica também foram realizadas e mostram uma correlação entre o aumento da tensão e a densidade dos filmes, tendo seus valores máximos ocorrido para filmes depositados a  $P_{N_2}=50\%$  ( $P=8Pa$ ). Os espectros Raman dos filmes mostram as bandas G e D, características de filmes grafíticos desordenados. Uma banda a frequências menores, chamada banda L e também associada à desordem, está presente nos espectros e seu pico desvia-se para frequências mais altas e sua FWHM diminui com o aumento da taxa de deposição dos filmes. Os espectros de IR das amostras mostram as bandas G e D do espectro Raman, que se tornam ativas devido à incorporação de nitrogênio no filme, uma banda à frequência de  $2220\text{ cm}^{-1}$ , atribuída a ligações  $C\equiv N$ , e ainda uma banda à  $3300\text{ cm}^{-1}$  que corresponde à ligação N-H, indicando a presença de hidrogênio no filme.

## ESTUDO DE CONDIÇÕES DE SUPRESSÃO DA NUCLEAÇÃO DO DIAMANTE CVD

*Clovis L. Fritzen, Rogério P. Livi e João A.H. da Jornada*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS

**Palavras-Chave:** nucleação, supressão, topografia

O conhecimento dos processos ou mecanismos de nucleação de diamante por CVD é fundamental tanto do ponto de vista físico quanto tecnológico. Neste trabalho realizamos um estudo sistemático de diferentes maneiras de reduzir ou suprimir sítios de nucleação previamente gerados. Para gerar um grande número de centros nucleadores, substratos de Si(100) polido foram riscados com pasta de diamante e em seguida limpos com acetona. Substratos assim preparados foram tratados de diferentes maneiras antes de submetidos a deposição do diamante CVD: a) Tratamentos térmico em diferentes atmosferas e várias temperaturas durante 1h. b) Implantação de diferentes tipos de ions, com diversas energias e várias doses. c) Deposição de filmes de silício amorfo de diferentes espessuras. Posteriormente estes substratos foram submetidos a deposição de diamante CVD pela técnica do filamento quente, sendo a temperatura do filamento de  $1900\text{ }^\circ\text{C}$ , temperatura do substrato de  $750\text{ }^\circ\text{C}$ , fluxo total dos gases de  $200\text{ sccm}$  (1% de  $CH_4$  em  $H_2$ ), pressão de 50 torr e 3h de deposição. Subseqüentemente, as amostras foram analisadas por diferentes técnicas, entre as quais microscopia eletrônica de varredura. Dos substratos tratados termicamente, aqueles tratados em vapor d'água e em argônio apresentaram considerável redução na densidade de nucleação para aqueles tratados a  $1000$  e  $1100\text{ }^\circ\text{C}$ . Aqueles tratados ao ar entre  $700$  e  $900\text{ }^\circ\text{C}$  apresentaram uma drástica diminuição na densidade de nucleação do diamante. No caso dos substratos implantados, observou-se uma acentuada diminuição na densidade de nucleação, que depende do tipo de ion, da dose e da energia de implantação bem como da temperatura do substrato mantida durante a implantação. Finalmente, os substratos cobertos com filme de silício amorfo apresentaram grande diminuição na densidade de nucleação para espessura do filme entre 2 e 5nm. O conhecimento da densidade relativa de nucleação em cada caso bem como a espessura das camadas de óxido e dos filmes de silício permitiram uma análise global dos diversos experimentos. Os resultados indicam que a topografia da superfície é um dos principais responsáveis pela nucleação do diamante CVD e que os detalhes topográficos (diversos tipos de defeitos) devem ser muito finos, da ordem ou menores que 5nm.

(CNPq, CAPES, FINEP, FAPERGS)

## NITRETO DE BORO OBTIDO POR PECVD A BAIXAS TEMPERATURAS

*M.N.P. Carreño, J.P. Bottechia, I. Pereyra*  
LME, Esc. Politécnica, USP, CP 8174, 05508-970, São Paulo, SP.

*Palavras-Chave* : nitreto de boro, pecvd

Dentre as novas ligas semicondutoras atualmente em estudo, o Nitreto de Boro (NB) é uma das mais interessantes. Trata-se de um material que na fase cristalina apresenta um gap óptico muito alto (~ 6 eV) e propriedades mecânicas extremamente interessantes devido à sua grande dureza e condutividade térmica. A obtenção de cristais de NB é, não obstante, muito difícil e ocorre a altíssimas temperaturas e pressões. Neste trabalho mostramos a viabilidade de fabricar filmes de NB pela técnica de PECVD ("Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition") a partir de misturas gasosas de Nitrogênio (N<sub>2</sub>) e Diborana (B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) a pressões menores que 1 Torr e temperaturas menores que 500 °C. Os filmes foram crescidos em diferentes condições, variando a potência de rf, a temperatura de substrato e a relação (N<sub>2</sub>/B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>). A caracterização do material envolveu medidas de absorção óptica e análise de espectroscopia de infra vermelho por Transformada de Fourier (FTIR) bem como a determinação das taxas de deposição. Os resultados tem sido bastante promissores e filmes crescidos em condições adequadas exibem espectros de infravermelho com picos característicos do NB hexagonal e cúbico. Também são de destaque os baixos níveis de incorporação de hidrogênio, que em algumas amostras, permanece abaixo dos níveis detectáveis pela técnica de FTIR. Por último, estamos trabalhando no aumento das taxas de deposição com o objetivo de obter filmes grossos (espessura > 1 µm) que permitam medidas confiáveis da dureza.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## PROPRIEDADES MECÂNICAS, ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DE FILMES DUROS DE a-C:H INCORPORADOS COM SILÍCIO.

*A.L. Baia Neto<sup>1,2</sup>, R.A. Santos<sup>1</sup> e S.S. Camargo Jr.<sup>1</sup>*  
<sup>1</sup> COPPE/UFRJ - Progr. de Eng. Metalúrgica e de Materiais.  
<sup>2</sup> UFRRJ - Depto. de Química.  
*R. Carius, F. Finger e W. Beyer*  
ISI-PV, KFA-Jülich, Alemanha.

*Palavras-Chave*: diamond-like, propriedades mecânicas, carbeto de silício.

Neste trabalho estudamos a relação entre as propriedades mecânicas, estruturais e eletrônicas de filmes de carbono amorfo hidrogenado (a-C:H) incorporados com silício, produzidos sob condições de deposição em que se obtém filmes de carbono amorfo hidrogenado duros de boa qualidade. Estes filmes foram depositados sobre substratos de silício cristalino e vidro Corning (7059), no catodo de um reator de descarga luminescente mantida por rádio frequência. Misturas de silano (SiH<sub>4</sub>) e metano (CH<sub>4</sub>) foram utilizadas em diferentes proporções. Os plasmas resultantes das misturas gasosas foram mantidos a uma pressão de 8 Pa e um self-bias de -200 Volts durante todas as deposições. Os resultados obtidos mostram que o silício é incorporado na rede substituindo átomos de carbono, afetando pouco a incorporação de hidrogênio no material. A incorporação de silício aumenta o caráter sp<sup>3</sup>, diminuindo em número e tamanho os aglomerados grafíticos. Do ponto de vista de sua microestrutura, os filmes com silício incorporado são menos densos, apresentando uma maior quantidade de voids que os filmes de a-C:H puro. Esta influência da incorporação de silício sobre a microestrutura do material é capaz de explicar a redução obtida na tensão interna residual destes filmes. No entanto, o aumento do caráter sp<sup>3</sup> é compensado pelo aumento na densidade de voids e pela substituição das ligações C-C por ligações Si-C, mais fracas, de forma que a dureza mecânica do material é aproximadamente independente da concentração de silício. Os filmes com silício incorporado apresentam uma densidade de defeitos relacionados ao processo de deposição que pode ser suprimida por tratamentos térmicos. Para filmes tratados térmicamente, observou-se que o mecanismo de condução é dominado por hopping no nível de Fermi, e é pouco afetado pela incorporação de silício.

## EFFICIENT FREQUENCY TRIPLING IN BULK GERMANOSILICATE AND $\text{Er}^{3+}$ -DOPED GERMANOSILICATE GLASSES PUMPED AT 1.319 $\mu\text{m}$

*M.T. de Araujo, M.V.D. Vermelho, J. Miguel Hickmann & A.S. Gouveia-Neto*

Departamento de Física - Universidade Federal de Alagoas

Maceió - 57072-970 - AL - Brasil

**Key-words:** glass, harmonic, rare-earth

In this work, we report on the generation of 120  $\mu\text{W}$  average power blue-violet light at 440 nm, through efficient frequency tripling of Nd:YAG laser pulses at 1.319  $\mu\text{m}$  in bulk germanosilicate and erbium-doped germanosilicate glasses. The fundamental source of radiation was a Q-switched and modelocked Nd:YAG laser operated at 1.319  $\mu\text{m}$ . Our investigations were conducted utilizing optical fiber performs samples both undoped and  $\text{Er}^{3+}$  doped germanosilicate core. Power spectrum of the third-harmonic (TH) signal at 440 nm emanating from a 2 mm thick sample of 8%  $\text{GeO}_2$ -doped silica based preform, pumped by 400 mW of average power at 1.319  $\mu\text{m}$  is observed. The blue-violet light at 440 nm was the unique visible radiation generated by the sample and had a bandwidth of less than 0.1 nm. The signal was generated in bursts of gaussian shaped Q-switch envelopes of  $\sim 400$  ns duration (FWHM) and the individual modelocked pulses within the envelope were measured to be  $\sim 200$  ps (resolution limit of our detection system). It is important to point out that the TH light was generated instantaneously with pump light illumination. The dependence of the third-harmonic signal power on the fundamental pump power was analyzed. The signal light at 440 nm presented a cubic dependence upon pump power as expected for a parametric third-harmonic generation process.

## LOCALIZAÇÃO DE FÓTONS EM UM MEIO DE DESORDENADO NA PRESENÇA DE GANHO

*Renato E. de Araujo, Anderson S. L. Gomes*

Departamento de Física da UFPE

**Palavras-Chave:** espalhamento, localização de fótons, amplificação

Em 1958 estudando o transporte de partículas em meios fortemente espalhadores, P.W. Anderson discutiu pela primeira vez o efeito da localização de elétrons em sólidos. Recentemente vários trabalhos mostram o efeito da localização fraca de fótons, análogo ao proposto por Anderson para elétrons, para ondas eletromagnéticas espalhadas retroativamente por meios desordenados. A localização da luz é um efeito que surgiu devido aos múltiplos espalhamentos coerentes e da interferência dessa luz espalhada. A intensidade da onda refletida por esses meios desordenados é altamente anisotrópica. Em um pequeno ângulo sólido na direção do feixe incidente a intensidade da luz espalhada retroativamente chega a ter o dobro do valor da intensidade da luz espalhada nas outras direções [1].

Nesse trabalho é mostrado o efeito da localização fraca da luz espalhada retroativamente por uma solução de microesferas de Rutilo ( $\text{TiO}_2$ ) em corante. Nessa solução observa-se também a emissão laser quando um feixe incide no meio, mesmo não havendo cavidade externa [2]. A experiência consistiu em incidir normalmente na célula com a solução de microesferas de Rutilo um feixe de laser de corante (610nm) e analisar o perfil espacial da luz espalhada retroativamente pelo meio. Um segundo feixe (532nm), com sua potência controlada, incidindo obliquamente na célula foi usada para bombear a solução controlando assim o ganho do sistema. Os resultados mostram uma variação na forma do cone característico da localização fraca de fótons quando o ganho no meio é alterado como proposto na Ref.[3].

- Referências: [1] E. Akkermans e colaboradores, 56 (1986) 1471  
[2] N. M. Lawandy e colaboradores, Nature 368 (1994) 436  
[3] A. Yu. Zyuzin, Europhys. Lett., 26 (1994) 517

## BIFURCAÇÕES E MÉDIAS DE VARIÁVEIS EM LASER CAÓTICO

A. Z. Khoury, L de B. Oliveira-Neto, G. J. F. T. da Silva e J.R. Rios Leite  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife, PE

*Palavras-chave:* Lasers, Chaos, Dinâmica de Lasers

A dinâmica de um laser de CO<sub>2</sub> monomodo com um absorvedor saturável na cavidade foi estudada pela detecção dos pulsos de chaveamento passivo do Q e pela detecção da potência média emitida. A derivada da potência média em relação ao parâmetro de controle das bifurcações, que é a tensão no piezoelétrico de sintonização da cavidade do laser, mostra as mudanças na pulsação, atravessando as cascatas de dobramento de período e entrando em regime caótico. Em cada transição entre regimes periódicos a taxa de variação da média da potência com o parâmetro mostra um pico [1], seguindo o *princípio de máxima emissão*, proposto para lasers multimodo [2]. Usando um modelo de equações de taxas para dois níveis de energia no absorvedor e três níveis no amplificador do laser obtivemos soluções numéricas para as variações da média que não seguem o resultado experimental. No regime caótico a média experimental tem grandes flutuações devido a existência de longos transitórios quasi-periódicos.

[1]. A. Z. Khoury, L de B. Oliveira-Neto, G. J. F. T. da Silva e J.R. Rios Leite, Phys. Rev. A (a sair) 1996.

[2] C. L. Tang and H. Statz, J. Appl. Phys. **38**, 2963 (1967)

Apoio FINEP, CNPQ e FACEPE.

## IMAGENS QUÂNTICAS COM FÓTONS GÊMEOS

G. A. Barbosa

CNPq / Departamento de Física — Universidade Federal de Alagoas  
(E-mail: [gbarbosa@fis.ufal.br](mailto:gbarbosa@fis.ufal.br))

**Palavras-Chave:** fótons gêmeos, imagem quântica, comunicação

Além do conceito tradicional das imagens em *intensidade* cristalizadas em nossas mentes pela experiência sensorial direta, um novo tipo de imagem começa a se revelar em experimentos recentes com detecções de fótons em coincidência [Phys. Rev. A **49**, 4176 (1994); Phys. Rev. Lett. **74**, 3600 (1995)]. Esse novo tipo de imagem se manifesta através de funções de correlação do campo eletromagnético de ordem mais alta do que a segunda ordem (intensidade), mesmo quando o padrão de intensidade não contenha a imagem. O nome *imagem quântica* está sendo associado a este fenômeno.

Informação pode ser “transmitida” não-localmente — e a grandes distâncias — se utilizando fótons gêmeos da *Luminescência Paramétrica de Conversão Descendente* (LPD). Exemplificamos o fenômeno iluminando um dado padrão (fenda dupla) “informação” a ser transmitida com um dos feixes gêmeos da LPD espontânea numa dada direção e mostramos que a franja de interferência era obtida através da correlação de quarta ordem com o outro feixe (“receptor”) noutra direção. Esta franja era *inexistente* no padrão de intensidade visto por cada detector. “Bits” 0 e 1 podem ser associados aos padrões gerados em quarta ordem pelas fendas duplas (0) e simples (1).

Somente agora uma teoria satisfatória sobre este tipo de imagem foi feita e engloba *todos* os fatos experimentais observados e indica uma variedade de dependências à serem observadas e testadas. Resultados experimentais serão mostrados e a teoria apresentada. A tecnologia para transmissão de *informação* através de *imagens quânticas* é disponível presentemente.

(CNPq, FINEP)

## INTERFERÊNCIA QUÂNTICA COM FÓTONS GÊMEOS

S. Pádua, P. H. Souto Ribeiro e G. A. Barbosa

Departamento de Física, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais

**Palavras-Chaves:** Ótica Quântica, Interferência Quântica, Luminescência Paramétrica

Fótons gêmeos “signal” (frequência  $\omega_s$  e vetor de onda  $\mathbf{k}_s$ ) e “idler” ( $\omega_i$ ,  $\mathbf{k}_i$ ) são gerados *simultaneamente* de um cristal não-linear, quando este é excitado por um laser no processo da luminescência paramétrica de conversão descendente. Realizamos um experimento, onde um processo de interferência quântica foi demonstrado. O feixe do laser de Kriptônio ( $\lambda = 413,1$  nm) é incidido em um cristal de  $\text{LiIO}_3$  e refletido sobre si mesmo (espelho frontal). Fótons de mesma frequência ( $\lambda = 826,2$  nm) são selecionados. Um fóton do feixe de laser pode gerar um par ( $S_1$ ,  $I_1$ ) na “ida” ou um par ( $S_2$ ,  $I_2$ ), após ser refletido. Os fótons  $S_1$  e  $I_1$ , são alinhados tal que os seus caminhos coincidam com os caminhos dos feixes  $I_2$  e  $S_2$ , respectivamente. A superposição é feita por dois espelhos (espelhos laterais), em uma configuração em anel triangular. Os detectores  $D_1$  e  $D_2$ , detectam os fótons “signal” e “idler” e as contagens de cada detector e a taxa de coincidências entre eles é registrada. Resultados experimentais mostram padrões de interferência nas taxas de contagens simples e de coincidências, quando um dos espelhos laterais ou o espelho frontal é deslocado por um PZT. Fisicamente, esta interferência pode ser explicada pela relação entre coerência mútua e a indistinguibilidade intrínseca entre os caminhos percorridos pelos pares de fótons. Se, sem perturbar a interferência, é impossível determinar se os pares originaram na primeira passagem do feixe de laser ou depois deste ser refletido, então as correspondentes amplitudes de probabilidade têm que ser adicionadas para se obter a probabilidade de detecção, e a interferência resulta.

Financiamento: FINEP, CNPq e FAPEMIG.

## INTERFERÊNCIA QUÂNTICA NA MISTURA DE QUATRO ONDAS COM ÁTOMOS DE RYDBERG

*Sandra S. Vianna, Paulo Nussenzveig<sup>†</sup>, Wictor C. Magno e José W.R. Tabosa*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-Chave:* interferência quântica, átomos de Rydberg, mistura de quatro ondas

Efeitos não lineares em vapor de Rubídio são investigados quando átomos altamente excitados - átomos de Rydberg - participam diretamente do processo [1,2]. Neste trabalho, estudamos a mistura de quatro ondas, onde o sinal gerado na frequência  $2\nu_1 - \nu_2$  é analisado próximo e sobre a ressonância de dois fótons. No experimento dois feixes de lasers, com frequências  $\nu_1$  e  $\nu_2$ , copropagantes, interagem com o sistema atômico. Variando a frequência  $\nu_1$  podemos observar um aumento na intensidade do sinal devido à ressonância, por dois fótons, com estados de Rydberg. Próximo destes níveis, o sinal de mistura de quatro ondas apresenta outra ressonância quando a frequência  $2\nu_1 - \nu_2$  coincide com o nível  $6p_{3/2}$  do Rubídio. Nesta região, o sinal gerado tem contribuição dos níveis intermediários,  $18s$  e  $16d$ , levando a dois caminhos quânticos possíveis. Estes dois caminhos são indistinguíveis, sendo necessário, portanto, somar amplitudes de probabilidade, o que resulta em uma interferência quântica entre níveis de Rydberg. Para observarmos esta interferência, variamos a polarização do laser na frequência  $\nu_1$ . Como o estado  $18s$  não pode ser excitado por dois fótons, com polarização circular, a partir do estado fundamental  $5s$ , este procedimento nos permite bloquear um dos caminhos quânticos acessíveis ao sistema. Como a interferência existe para qualquer frequência  $\nu_1$ , é possível detectar o efeito em cima do pico correspondente ao nível  $6p_{3/2}$ . Neste caso, o aumento observado na intensidade do sinal indica que a excitação do nível  $6p_{3/2}$  é mais eficiente com apenas um caminho quântico "aberto" do que com dois, isto é, quando o laser tem polarização linear e uma interferência destrutiva ocorre.

<sup>†</sup>Endereço permanente: Instituto de Física-USP

[1] S.S. Vianna, J.W.R. Tabosa e F.A.M. de Oliveira, *Optics Comm.* **116** (1995) 67.

[2] S.S. Vianna, J.W.R. Tabosa, W.C. Magno e M. Chevrollicr, submetido à IQEC'96.  
(CNPq, FINEP, FACEPE).

## EMIÇÃO ESPONTÂNEA EM UMA MICROCAVIDADE FABRY-PEROT PLANA

*S. M. Dutra and K. Furuya*

IFGW, UNICAMP, Campinas, SP 13081-970.

*Palavras-Chave:* microcavidade, ruído, emissão espontânea

Estudamos os efeitos das flutuações quânticas do dipolo elétrico de um átomo em uma microcavidade no ruído quântico da radiação de emissão espontânea que escapa para fora da microcavidade. A radiação transmitida ao exterior de um micro Fabry-Perot plano, produzida pela emissão espontânea de um único átomo no interior do Fabry-Perot, foi estudada por De Martini et al<sup>1</sup> e Dutra e Knight<sup>2</sup>. Estes autores, entretanto, desprezaram os efeitos das flutuações quânticas do dipolo elétrico do átomo<sup>1,2</sup>.

Neste trabalho, adotamos o mesmo modelo desenvolvido por Dutra e Knight<sup>2</sup> e nos limitamos ao caso para o qual foi demonstrado<sup>2</sup> que a emissão espontânea dentro da cavidade gera um feixe de Bessel<sup>3</sup> (não sofre difração). O modelo consiste em dois espelhos planos e infinitos, um perfeito e o outro semi-transparente. A estrutura interna dos espelhos é desprezada e eles são tratados como meras condições de contorno. O campo é quantizado para os modos do sistema todo, cavidade e exterior.

Calculamos a variância no número de fótons quando o átomo se encontra inicialmente no estado excitado e mostramos que a estatística é Poissoniana. O cálculo da distribuição espacial do número de fótons revela que há mais fótons na periferia do feixe do que no centro, confirmando que a maior parte da energia está nos picos laterais da função de Bessel e não no central<sup>3</sup>. Obtemos também a variância do campo elétrico do lado de fora da microcavidade e concluímos que as flutuações quânticas do dipolo elétrico do átomo não contribuem quando o átomo é preparado inicialmente no estado excitado.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

1. F. De Martini, M. Marrocco, P. Mataloni, L. Crescentini and R. Loudon, *Phys. Rev. A* **43**, 2480 (1991)

2. S. M. Dutra and P. L. Knight, *Opt. Commun.* **117**, 256 (1995); S. M. Dutra and P. L. Knight, *Phys. Rev. A* (to appear)

3. J. Durnin, *J. Opt. Soc. Am.* **A4**, 651 (1987); J. Durnin, J. J. Miceli Jr and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1499 (1987)

## ESTADOS BINOMIAIS PUROS, MISTURAS ESTATÍSTICAS E DISSIPACÃO

*Antonio Vidiella Barranco e José Antonio Roversi*

Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física "Gleb Wataghin"  
Departamento de Eletrônica Quântica - Caixa Postal 6165 - 13083-970 Campinas -SP.

*Palavras-Chave:* óptica quântica, estados não-clássicos da luz, decoerência

Os estados binomiais puros são estados não clássicos que interpolam continuamente entre os estados coerentes e os estados de número, de maneira que surgem estados com distintas propriedades não clássicas, que já vieram sendo discutidas na literatura. Apesar de existirem algumas proposições para sua geração, os estados binomiais não foram ainda produzidos no laboratório. Por outro lado, misturas estatísticas de estados de número com peso binomial, ou estados binomiais misturados, surgem naturalmente em processos dissipativos, envolvendo o decaimento do estado de número através de perdas de um fóton. Esses estados misturados interpolam entre um estado puro (estado de número), e um estado misturado (estado do tipo laser com difusão de fase). Neste trabalho estabelecemos comparações entre as propriedades estatísticas dos estados binomiais puros e os misturados. Apesar dos estados misturados não serem puros, estes também tem propriedades não-clássicas. São utilizadas quasiprobabilidades no espaço de fase. Também estudamos a perda de coerência quântica de um campo preparado num estado binomial, assim como em superposições de estados binomiais, através da dissipação. O aspecto mais enfatizado foi a pureza do estado do campo em função do tempo. Se tivermos um estado coerente inicial este não apenas continuará puro, mas também coerente. A situação para um estado de número inicial é bem diferente. Temos então uma "interpolação" destes comportamentos quando usamos estados binomiais como estados iniciais. O grau de pureza do campo está fortemente correlacionado com a condição de quase mínima incerteza dos estados binomiais.

(CNPq)

## RECONSTRUÇÃO DE IMAGENS TOMOGRÁFICAS UTILIZANDO O ALGORITMO BACKPROPAGATION

*Renato Glauco de Souza Rodrigues, Carlos Alberto Pelá  
e Antonio Carlos Roque da Silva*

Departamento de Física e Matemática - FFCLRP-USP

**Palavras-chave:** Tomografia, *Backpropagation*, Redes Neurais

A vantagem em utilizar redes neurais para a reconstrução de imagens tomográficas reside no fato de que, uma vez treinada, a rede é capaz de fornecer uma imagem de ótima qualidade, em um tempo relativamente curto. Publicações recentes<sup>1</sup> tem mostrado a viabilidade da aplicação do algoritmo *backpropagation* na reconstrução de imagens tomográficas. Nosso trabalho descreve a utilização do algoritmo *backpropagation*, com unidades contínuas, na reconstrução de imagens tomográficas bidimensionais (36x36) a partir de projeções. As redes testadas até o momento têm 1296 neurônios de entrada, 1296 neurônios de saída e de 3 a 2000 neurônios na camada escondida. Essas redes são treinadas através de uma regra de aprendizado supervisionado para aprender uma relação de associação entre padrões gerados por transmissão de raios-x (simulado) e as imagens (simuladas); eles correspondentes. Testes iniciais demonstram que as imagens obtidas com *backpropagation* tem qualidade superior e são reconstruídas com maior rapidez quando comparadas com o método de retroprojeção simples. O método de retroprojeção simples utiliza a regra do gradiente descendente para minimizar o erro projeção a projeção e foi implementado para ser comparado com o método que utiliza *backpropagation*. Apesar do método baseado em *backpropagation*, apresentar-se potencialmente superior, sérios problemas estão sendo enfrentados com relação à convergência e à generalização.

1 - John P. Kerr and Eric B. Bartlett. "A statistically tailored neural network approach to tomographic image reconstruction", Med. Phys. 22 (5), May 1995.

(CNPq, FAPESP e CAPES)

## DESENVOLVIMENTO DE UM PHANTOM MATEMÁTICO PARA MEDICINA NUCLEAR

*Sérgio Q. Brunetto, Sérgio S. Müller, Wietske I. Meyering, Márcio T. Pereira,  
Lorena Pozzo, Eduardo T. da Silva*

Centro de Engenharia Biomédica - Unicamp, Departamento de Engenharia Biomédica - FEE - Unicamp,  
Departamento de Geologia, Física e Matemática - FFCLRP - USP

**Palavras-Chave:** medicina nuclear, cintilografia, *phantom* matemático

Os processos físicos que influenciam a qualidade das imagens diagnósticas em Medicina Nuclear podem ser analisados através de simuladores matemáticos. Estes simuladores operam a partir de *phantoms* matemáticos que reproduzem a geometria e a distribuição do radionuclídeo nos órgãos e sistemas de interesse. Neste trabalho, apresentamos um *phantom* matemático, desenvolvido em C++, que permite simular a distribuição do radionuclídeo no órgão sob estudo. O algoritmo permite somar várias matrizes, sendo que cada uma contém o radionuclídeo distribuído uniformemente segundo formas geométricas regulares. O resultado da soma destas distribuições permite reproduzir aproximadamente a geometria do órgão e a disposição das lesões hipocaptantes e hipercaptantes. Determinada a distribuição do radionuclídeo, considera-se que cada sítio emite isotropicamente, sendo que o decaimento ocorre segundo a distribuição de Poisson. A atenuação da radiação emitida num determinado sítio é calculada a partir da distância deste até a superfície e do coeficiente de atenuação. Consideramos para o cálculo do coeficiente de atenuação, que o efeito fotoelétrico e o espalhamento incoerente são os processos dominantes na faixa de energia típica dos isótopos utilizados em medicina nuclear (70 à 400 KeV). O fluxo será resultado da integração das emissões em cada sítio, numa determinada direção e ângulo sólido, corrigidas pela atenuação. Desta forma, o algoritmo permite reproduzir as emissões de uma distribuição volumétrica específica de radionuclídeo para uma linha de visada arbitrária.

## ANÁLISE ESPACIAL DA UNIFORMIDADE EM CÂMARAS DE CINTILAÇÃO

*Sérgio Q. Brunetto, Sérgio S. Müller, Wietske I. Meyering, Márcio T. Pereira,  
Lorena Pozzo, Eduardo T. da Silva*

Centro de Engenharia Biomédica - Unicamp, Departamento de Engenharia Biomédica - FEE - Unicamp,  
Departamento de Geologia, Física e Matemática - FFCLRP - USP

Os protocolos internacionais IAEA, AAPM, e NEMA sugerem uma avaliação visual e quantitativa (coeficiente de uniformidade integral e diferencial) do grau de uniformidade das câmaras de cintilação. Neste trabalho apresentamos um procedimento que permite estabelecer parâmetros de referência seguros do equipamento através de uma análise baseada em conceitos probabilísticos. Para estimar a uniformidade da imagem verificamos inicialmente se as flutuações na contagem e na distribuição espacial deve-se unicamente a processos estocásticos. Primeiro, determinamos a distribuição contagem/pixel para várias regiões de interesse (ROI). Com estas distribuições verificamos se o comportamento das câmaras de cintilação satisfazem à uma distribuição normal. Podemos examinar a existência de anomalias resultantes de defeitos ou descalibrações do equipamento, através da análise da correlação entre as curvas ajustadas e os dados obtidos. Analisamos a distribuição espacial das flutuações estudando o coeficiente de uniformidade calculado em setores angulares de  $12^\circ$ , como função da posição angular. O sinal  $h(\theta)$  assim obtido, é composto de um sinal determinístico  $f(\theta)$ , associado a características intrínsecas do equipamento, e a uma flutuação randômica  $v(\theta)$ . Analisando o sinal  $h(\theta)$  é possível obter  $f(\theta)$  e, desta forma, identificar a ocorrência de desvios sistemáticos na uniformidade. Aplicamos este procedimento às aquisições obtidas com uma câmara de cintilação Elscint APEX SP4 HR do Serviço de Medicina Nuclear/HC-Unicamp. Os resultados indicam que os parâmetros quantitativos obtidos podem ser considerados como uma referência das câmaras de cintilação e permitem a avaliação de sua uniformidade.

(CNPq, CAPES)

## ESPECTROSCOPIA DE FOTOIONIZAÇÃO EM LÂMPADA DE CATODO OCO DE DESCARGA PULSADA

*José W. Neri, Carlos A. B. da Silveira, Nicolau A. S. Rodrigues,  
Marcelo G. Destro, Rudimar Riva e Carlos Schwab*

Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP

*Palavra-Chave:* espectroscopia, fotoionização, catodo oco

Lâmpada de Catodo Oco (LCO) são ferramentas versáteis, compactas, simples e confiáveis que fornecem vapores de metais para propósitos espectroscópicos. As colisões de íons da descarga com as paredes do catodo podem produzir um denso vapor do material constituinte do mesmo. LCO's têm sido usadas não somente em espectroscopia de um foton mas também em espectroscopia de absorção multifotônica, embora neste último caso o gás de "buffer" e a corrente elétrica tenham efeitos nocivos. Colisões com elétrons e com o gás de "buffer" podem ocasionar transições dos átomos para estados altamente excitados ou induzir um decaimento a partir de estados excitados, permitindo, em geral, apenas detecção de absorção sequencial de até 2 fótons no espectro visível. Gagné e colaboradores mostraram que, no caso específico de uma lâmpada com catodo oco pulsada feita de urânio e usando Ar como gás de "buffer", é possível obter vapor de U com densidade de aproximadamente  $10^{13}$  cm<sup>-3</sup>, por períodos maiores que um milsegundo após a descarga ser desligada. Neste trabalho descrevem-se experimentos realizados em uma Lâmpada de Catodo Oco de Urânio de Descarga Pulsada com o objetivo de obter uma fonte de vapor de urânio metálico para uso em espectroscopia de fotoionização. O vapor de urânio é gerado por uma descarga elétrica pulsada cujo circuito permite medida de corrente elétrica no pós-descarga. Íons de Urânio são produzidos usando um esquema de fotoionização por absorção sequencial de três fótons de dois comprimentos de onda, gerados por lasers de corante bombeados por lasers de vapor de cobre.

## MOVIMENTO QUÂNTICO DE UMA PARTÍCULA NA ARMADILHA DE PAUL

*Grácio P. P. Serra<sup>1</sup>, Inácio A. Pedrosa<sup>2</sup>, e Ilde Guedes*

Departamento de Física - Centro de Ciências - Universidade Federal do Ceará

<sup>1</sup> Departamento de Física - Universidade Federal do Pará

<sup>2</sup> Departamento de Física - Universidade Federal da Paraíba

*Palavras-Chave:* Armadilhas, Invariantes, Oscilador Harmônico

A armadilha de Paul é um dispositivo que permite a realização de vários experimentos extremamente interessantes com partículas carregadas. A configuração usual da armadilha de Paul resulta em um potencial quadrupolar oscilante. Assim, o movimento resultante de um íon pode ser descrito, para cada uma das coordenadas retangulares, pela Hamiltoniana do oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Do ponto de vista da Mecânica Clássica, resolver este problema, significa resolver a equação de Mathieu. De acordo com os valores dos parâmetros utilizados na armadilha, a resolução da equação de Mathieu fornece soluções estáveis ou instáveis. Na prática utiliza-se, claro, valores para os quais tenhamos sempre as soluções estáveis. Agora, do ponto de vista da Mecânica Quântica resolver este problema, significa encontrar os autoestados e as autoenergias correspondentes. Em resumo, devemos resolver a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico com frequência dependente do tempo. Entre as várias possíveis formas de solução, vamos determinar as autofunções e as autoenergias utilizando o método dos Invariantes de Ermakov. Basicamente, este método permite-nos através de apenas uma transformação unitária rescrevermos a equação de Schrödinger para o operador  $H(t)$  que é dependente do tempo, em uma outra equação de Schrödinger para o oscilador harmônico com frequência constante. Assim, as soluções obtidas para as funções de onda são aquelas envolvendo os polinômios de Hermite e as autoenergias são simplesmente dadas por  $\lambda_n = h\left(n + \frac{1}{2}\right)$ .

## Nova Técnica para Medida de Colisões Frias entre Átomos de Potássio em um MOT no Regime de Baixas Intensidades

*M.S. Santos, P. Nussenzeig\*, S.C. Zilio e V.S. Bagnato*

Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* Lasers, Aprisionamento de Potássio, Colisões Frias

Medimos a taxa de perdas por colisão entre átomos de Potássio frios como função da intensidade do laser aprisionador. O procedimento usual usado para medir a dinâmica de perdas se baseia no processo de carregamento da armadilha. Entretanto, no regime de baixas intensidades, o processo de carga da armadilha fica prejudicado. Neste trabalho, introduzimos uma nova técnica que consiste em mudar repentinamente a intensidade do laser aprisionador e observar a variação do número de átomos aprisionados. Essa técnica nos permite alcançar o regime de baixas intensidades, inclusive abaixo da intensidade de saturação, sem as limitações da técnica tradicional.

Em função das vantagens da técnica que introduzimos, nos concentramos no estudo de colisões no regime de baixas intensidades, em que as perdas por colisão com mudança de estrutura hiperfina do estado fundamental são dominantes. O estado fundamental do átomo de Potássio possui dois estados hiperfinos  $F = 1$  e  $F = 2$  separados por 462 MHz. Sendo assim, em uma colisão entre dois átomos no estado fundamental em que pelo menos um deles passa do estado  $F = 2$  para  $F = 1$ , o par de átomos têm um ganho em energia igual ao desdobramento hiperfino. Esse ganho é convertido em energia cinética que é suficiente para que os átomos escapem da armadilha, no regime de baixas intensidades. Para intensidades mais altas o potencial confinante cresce e se torna maior do que a energia cinética ganha na troca de estado hiperfino. Portanto, abaixo de uma intensidade crítica a taxa de perdas por colisão cresce abruptamente.

O interesse desse trabalho é apresentar as primeiras medidas de perdas por colisões frias para o Potássio em função da intensidade laser e também introduzir uma maneira simples de estudar colisões frias em uma armadilha magneto-ótica no regime de baixas intensidades.

\*Endereço Permanente: Instituto de Física - Universidade de São Paulo

## MODIFICAÇÃO DE COLISÕES ULTRAFRIAS POR CAMPOS DE LUZ POLARIZADOS DE ALTA INTENSIDADE E NÃO RESSONANTES

*R. Napolitano, L. Marcassa, S. Muniz, S. Zilio, V. Bagnato, J. Weiner\*, P. S. Julienne\*\**

Instituto de Física de São Carlos - USP

\*Department of Chemistry and Biochemistry - University of Maryland at College Park

\*\*National Institute of Standards and Technology - Gaithersburg

*Palavras-Chave:* colisões, ultrafrias, polarização

No regime ultrafrio, as estruturas hiperfinas de átomos alcalinos se tornam resolvíveis. Portanto, descrições realísticas de colisões binárias entre átomos alcalinos neutros requerem um tratamento de múltiplos canais. Damos um primeiro passo em direção a uma tal abordagem considerando o encontro colisional de dois átomos desprovidos de spins no espaço tridimensional. Nossos cálculos supõem que o espalhamento ocorre na presença de um campo de luz forte, polarizado e não ressonante. A transição atômica envolvida neste modelo é de um estado fundamental  $^1S$  para um primeiro estado excitado  $^1P$ . No caso de um campo de luz de baixa intensidade este modelo tridimensional concorda com aproximações semi-clássicas de cruzamento de duas curvas de potencial. No caso de um campo de luz de alta intensidade nossos cálculos descrevem qualitativamente o comportamento medido da saturação de supressão óptica de colisões ultrafrias. Nosso modelo mostra uma saturação com a intensidade do laser muito mais lenta do que a predita por modelos de dois estados. Também predizemos qualitativamente bem a observada dependência com polarização da luz, em que polarização circular é mais eficiente para blindar átomos ultrafrios do que polarização linear. Além disto, esta eficiência é acompanhada por um limitado aquecimento da amostra devido à produção de átomos excitados e um aumento de ordens de magnitude na seção de choque transversal elástica do estado fundamental. Estes resultados sugerem que se possa aumentar a eficiência de resfriamento evaporativo em armadilhas magnéticas com a introdução de um laser forte altamente fora de ressonância. J. W. e P. S. J. agradecem suporte da National Science Foundation, do Army Research Office, e do Office of Naval Research. Os demais autores agradecem suporte financeiro do CNPq e da FAPESP.

## O MODELO DE BAXTER-WU - INVARIÂNCIA CONFORME E CORREÇÃO DE ESCALA

F. C. Alcaraz e J. C. Xavier  
Universidade Federal de São Carlos - SP

*Palavras-Chaves:* interação de multispin, Baxter-Wu, *ansatz* de Bethe

Um dos modelos mais simples e interessantes envolvendo interações de três corpos é o modelo de Baxter-Wu. Tal modelo é definido na rede triangular com interações de três corpos definidas em cada triângulo elementar de um arranjo ( "rede" ) triangular. O modelo, possui uma simetria  $D(4)$  análoga à do modelo de Potts com 4 estados, exibindo para temperaturas baixas paredes de domínios com a mesma estrutura ( energia entre estados fundamentais ) que o modelo de Potts de 4 estados. Tal situação indica que os dois modelos pertencem à mesma classe de universalidade. O modelo de Baxter-Wu, ao contrário do modelo de Potts, foi resolvido ( pelo menos parte do espectro ), para qualquer temperatura, generalizando o *ansatz* de Bethe por Baxter e Wu ( Phys. Rev. Lett. **31**, 1294 (1973) ). A solução exata deste modelo indica que realmente o modelo está na mesma classe de universalidade do modelo de Potts com 4 estados. Contudo desde os primeiros cálculos numéricos, por "finite-size scaling" mostram que os modelos comportam-se de forma bastante distintas quanto a estas correções. O modelo de Potts com 4 estados exibe correção logaritma com o tamanho do sistema, dificultando a sua análise, o que já não acontece com o modelo de Baxter-Wu. Neste trabalho fazemos um estudo global do conteúdo operatorial do modelo utilizando-nos das relações advindas da invariância conforme. A nossa análise é feita estudando-se o espectro do modelo em cadeias finitas, e extraindo as dimensões dos operadores ( relacionado com os expoentes críticos ) que governam a física a longas distâncias dos modelos. O espectro é calculado com redes de até  $(300 \times \infty)$  sítios resolvendo-se as equações do *ansatz* de Bethe associado ao modelo. Tais equações foram obtidas mediante a generalização do seu *ansatz* de Bethe ( veja outro trabalho no mesmo encontro ).

( FAPESP, CNPq )

## PHASE DIAGRAMS OF THE THREE-DIMENSIONAL DILUTED ANTIFERROMAGNET $Fe_xZn_{1-x}F_2$ AT INTENSE FIELDS

F.C. Montenegro and K.A. Lima, M. S. Torikachvili<sup>2</sup>, A. Lacerda<sup>3</sup>  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife, Brazil

<sup>2</sup>Department of Physics, San Diego State University,  
San Diego, California 92182-2222

<sup>3</sup>National High Magnetic Field Laboratory Mail Stop E536,  
Los Alamos NM 8745, USA

*Palavras-Chaves:* Magnetic phase diagram; random fields; spin glasses.

The critical,  $T_c(H)$ , and equilibrium,  $T_{eq}(H)$ , phase boundaries of the archetypal  $d = 3$  Random-Field-Ising Model (RFIM) system  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  have been mapped in a  $(H, T)$  phase diagram for samples with  $x = 0.41, 0.56$  and  $0.60$  under strong random fields. As well known, a concave curvature on both  $T_c(H)$  and  $T_{eq}(H)$  is obtained applying moderate uniform fields in the direction of the easy axis of this diluted antiferromagnetic (DAF) compound. In this regime, these lines are governed by the universal REIM to RFIM crossover exponent  $\phi \cong 1.4$ . In DAF compounds, the magnitude of the random field can be controlled by the external field  $H$ . For concentration close to the percolation threshold ( $x_p = 0.24$ ), random fields of strong magnitudes induce a glassy phase in the upper part of the  $(H, T)$  phase diagram. The curvature of the equilibrium phase boundary changes to a convex shape now governed by an exponent  $\phi \cong 3.4$ , similar to the de Almeida-Thouless (AT) line in spin glasses (SG). In this work we present new results relative to the effects of strong random fields in higher concentrated samples of  $Fe_xZn_{1-x}F_2$ . We have used a vibrating sample magnetization technique in fields up to 20 Tesla, extending the interval of concentrations to  $0.24 < x < 0.6$ . The measurements have been performed at the facilities of the National High Magnetic Field Laboratory, Los Alamos U.S.A. The collected data reveals that the glassy phase induced by strong random fields is not restricted to the vicinity of  $x_p$ . SG-like behavior is present at strong  $H$  for all values of  $x$  measured. On the other hand, we have not found any evidence of a spin-flop (SF) phase for all samples with  $x < 0.6$  for  $H < 20$  T.

Work partially supported by CNPq, CAPES, FINEP and FACEPE

## MONTE CARLO DINÂMICO : UNIVERSALIDADE LONGE DO EQUILÍBRIO

*Cláudia S. Simões, Valter Libero e J. R. Drugowich de Felício*

Fac. de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto e Instituto de Física de São Carlos  
Universidade de São Paulo.

*Palavras-Chave:* interações de multispins, scaling temporal, universalidade

O fenômeno conhecido como "critical slowing down" representa uma dificuldade quase intransponível para as simulações feitas a temperaturas muito próximas da temperatura crítica. Algoritmos como os de Swendsen-Wang e de Wolff, tentam driblar essa barreira trabalhando com ilhas inteiras de spins a cada passo da simulação. Nesse caso, porém, cada passo de Monte Carlo fica tão demorado que não há como comparar o expoente dinâmico  $z$  (que mede a dependência do tempo de relaxação  $\tau$  com o comprimento de correlação  $\xi$ ) com os casos em que as operações elementares envolvem apenas inversões de um spin. Além disso, a generalização do conceito de ilha (ou "cluster") de cada um desses algoritmos (S-W e Wolff) não é uma tarefa banal e trabalhos como o de Mauricio Bouabci e C.E. Carneiro - analisando o modelo de Blume-Emery-Griffiths - dão conta das dificuldades a serem superadas, mesmo nos casos em que as variáveis fogem minimamente do tradicional modelo de Ising. Trabalhos recentes, no entanto, têm procurado solucionar esse impasse simulando sistemas muito longe do equilíbrio. Nesse caso, as médias são feitas sobre um grande conjunto de amostras e não sobre estados de Gibbs como é o usual. A expressão para o cumulante de Binder generalizado, bem como a magnetização ou seu quadrado, podem ser utilizadas para o cálculo não só do expoente crítico dinâmico  $z$  mas também para obtenção de  $\beta$  e  $\nu$ . O modelo de Ising bidimensional com interações de três spins - em apenas uma direção - é o toy model utilizado nesse trabalho.

(CNPq, CAPES e FAPESP)

## DIFRAÇÃO MAGNÉTICA DE RAIOS X CIRCULARMENTE POLARIZADOS PARA O ESTUDO DE $H_0$ ANTIFERROMAGNÉTICO

C. Sutter<sup>1</sup>, G. Grübel<sup>1</sup>, C. Vettier<sup>1</sup>, D. Gibbs<sup>2</sup>, F. de Bergevin<sup>3</sup>, A. Stunault<sup>1</sup>,  
C. Giles<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

<sup>2</sup>NLS, Brookhaven National Laboratory, Upton N.Y., USA

<sup>3</sup>Laboratoire de Cristallographie, CNRS, Grenoble, France

<sup>4</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPq, Campinas-SP

*Palavras-Chave:* difração magnética de raios-X, polarização circular de raios-X, antiferromagnetismo espiral.

O rápido desenvolvimento de fontes de radiação síncrotron que permitem o controle do estado de polarização do feixe de raios-X, além da ótima resolução do vetor de onda, a seletividade em energia e o alto fluxo tem tornado a difração magnética de raios-X uma técnica complementar à difração magnética de neutrons para o estudo do magnetismo em escala atômica. Mesmo sendo 3 a 4 ordens de magnitude mais fraca do que a difração de carga, a difração magnética de raios-x permite medir separadamente as componentes orbital e de spin do momento magnético eletrônico variando-se convenientemente o estado de polarização do feixe incidente. Perto de uma borda de absorção a difração magnética pode aumentar de várias ordens de grandeza tornando-se comparável ao espalhamento de carga. Neste trabalho descrevemos a utilização da polarização circular do feixe de raios-X para investigar, pela primeira vez, os domínios magnéticos em um antiferromagneto espiral como o holmium monocristalino por difração magnética de raios-X. Este experimento realizado no ESRF (Grenoble), utilizando lâminas quarto de onda de diamante para obter-se polarização circular de helicidade variável, mostra que é possível mapear domínios magnéticos espirais utilizando-se a difração magnética de raios-X. Uma estação experimental utilizando esta técnica está sendo proposta para o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), com o objetivo de fornecer à comunidade Brasileira de magnetismo esta nova técnica para o estudo de materiais magnéticos a nível atômico. O projeto desta linha assim como diferentes experimentos que poderão ser realizados nesta estação do LNLS também serão discutidos.

(ESRF, CNRS, RHA/CNPq)

## $He^3$ POLARIZADO POR DILUIÇÃO E MEDIDAS DA PRESSÃO OSMÓTICA DO $He^3$ POLARIZADO DILUÍDO EM $He^4$ SUPERFLUIDO

Alexandre R. Rodrigues

UFPE-Departamento de Física, 50739 Recife, Pernambuco Brasil

Gerard Vermeulen

CRTBT-CNRS, BP 166, 38042 Grenoble-Cedex9-France

*Palavras Chave:* Fermions, polarização, refrigerador à diluição, pressão osmótica

O  $He^3$  possui um spin nuclear  $1/2$ , sendo portanto um Fermion. Polarizar o  $He^3$  significa colocar os spins numa direção preferencial. Devido ao princípio de Pauli a polarização do  $He^3$  muda as propriedades de transporte e termodinâmicas do líquido. Desta forma, o estudo do líquido polarizado contribui para a melhor compreensão de sistemas de fermions em interação. Entretanto, o  $He^3$  líquido é muito difícil de polarizar. Para se obter polarizações consideráveis é necessária a utilização de campos magnéticos  $B$  tais que  $\mu_B \approx k_B T_F$ ,  $\mu$  é o momento magnético nuclear e vale  $0.8 \text{ mK/T}$ ,  $k_B$  a constante de Boltzman, e  $T_F$  a temperatura de Fermi do líquido que vale aproximadamente  $300 \text{ mK}$ . Ou seja,  $B$  deve ser da ordem de centenas de Tesla. Nós desenvolvemos um método onde a polarização do líquido é obtida fora do equilíbrio mas de forma estacionária a temperaturas de aproximadamente  $10 \text{ mK}$ . O  $He^3$  líquido é polarizado por meio de um refrigerador à diluição [1] onde o  $He^4$  superfluido é circulado. Polarizações estacionárias de 15% [1] foram obtidas em um campo de  $7T$ , ou seja, 7,5 vezes o valor da polarização de equilíbrio com o campo magnético. O comportamento do sistema com a pressão permitiu também corrigir os valores da susceptibilidade da fase diluída da mistura  $He^3$  -  $He^4$ . Utilizando este sistema foi medida pela primeira vez a pressão osmótica do  $He^3$  diluído no  $He^4$  superfluido como função da polarização[2].

[1] A.Rodrigues and G.Vermeulen, Symposium on Quantum Fluids & Solids, Cornell USA, 1995 [invited paper]

[2] A.Rodrigues, Ph.D Thesis, CNRS Grenoble-France, 1995.

## Synchrotron Radiation Multiple Diffraction in the Study of Electric Field Effects in MBANP Organic Nonlinear Optical Material

*Lisandro Pavia Cardoso*<sup>\*</sup>, *Susan Elizabeth Girdwood*, *David Pugh* and *John Neil Sherwood*  
Department of Pure and Applied Chemistry, University of Strathclyde, Glasgow, UK  
*José Marcos Sasaki*<sup>†</sup> and *Kevin John Roberts*

Department of Mechanical and Chemical Engineering, Heriot-Watt University, Edinburgh, UK

**Key words:** X-ray Multiple Diffraction, Synchrotron Radiation, Organic crystal

In this work, the X-ray multiple diffraction technique using synchrotron radiation is applied as a novel probe to study the electric field effects in MBANP organic nonlinear optical material. The inherent sensitivity to micro-crystallographic changes makes this technique ideal for examining subtle changes (strain) in the lattice geometry of these materials under external stimulus and then, the accurate determination of the piezoelectric coefficients. High quality, non-centrosymmetric, (-)-2-( $\alpha$ -methylbenzylamino)-5-nitropyridine (MBANP) single crystals are analysed with high resolution multiple diffraction using the set-up for Renninger Scan (RS) on station 7.6 at Daresbury Laboratory radiation source. The distortion of the organic crystal lattice (strain) is measured from the RS obtained during the application of an electric field along the monoclinic twofold crystallographic (010) MBANP polar axis. This should bring the two molecular dipoles in the unit cell into better alignment, thereby increasing the  $b$  lattice parameter and reducing  $a$  and  $c$  to keep the same cell volume. The calculated effect of an electric field applied in the (010) direction has shown the  $(1\bar{1}6)$  peak is extremely sensitive to the field while  $(\bar{4}00)$  and  $(\bar{2}00)$  which are related to the  $d_{21}$  piezoelectric coefficient and  $(0\bar{4}0)$  and  $(0\bar{2}0)$  related to  $d_{22}$  coefficient exhibit a detectable change in position.  $(00\bar{6})$  MBANP RS were carried out with an increasing electric field up to 600 V/cm. Peak shifts to higher angles of the surface peak  $(03\bar{3})$  (cases of extreme asymmetry) were measured and the similar behaviour was also measured to the (020) peak.

(CNPq)

<sup>\*</sup> On leave from IFGW, UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brazil

<sup>†</sup> Current address: Dept. Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará, Brazil

## ANALYSIS OF Z-SCAN TECHNIQUE IN PHOTOREFRACTIVE CRYSTALS

*Shaoping Bian and Jaime Frejlich*

Laboratório de Óptica, Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas - SP

**Palavras-Chave:** Z-scan, photorefraction, Gaussian beam

The far-field diffraction pattern is derived for a photorefractive crystal under an external applied electric field in a Z-scan configuration based on the analysis of the propagation of a Gaussian beam wavefront with spatial phase distortion. The on- and off-axis Z-scan normalized transmittance are calculated by means of the derived far-field diffraction pattern. A background uniform illumination is used for avoiding the screening of the applied electric field inside the crystal. The shape of the Z-scan transmittance is dependent on the intensity ratio between the probe and the background illumination. For small photorefractive nonlinearity, the Z-scan transmittance is similar to that observed for the Kerr nonlinearity. The (on- and off-axis) Z-scan experiments are carried out with a Ce-doped (0.1wt.%)  $\text{Sr}_{0.61}\text{Ba}_{0.39}\text{Nb}_2\text{O}_6$  crystal with different external applied electric field at  $\lambda = 633\text{nm}$ . The nonlinear phase change is obtained from the best fit of the experimental data to the theoretical formula. The measured on-axis Z-scan curves show a good consistency with the theory and demonstrate clearly the self-focusing effect in the photorefractive crystal sample. The effective electro-optic coefficient  $r_{33}$  of the crystal is determined from the on-axis Z-scan experiments which is in good agreement with the value reported in the literature. Z-scan with enhanced sensitivity can be realized by detecting the light irradiance at the off-axis positions in the far field. Such a sensitivity enhancement is interesting for characterizing photorefractive crystals showing a small nonlinearity. However, the off-axis Z-scan experiment shows a deviation from the theoretical prediction. The reason for this deviation is also discussed.

(CNPq)

## ANARMONICIDADE DOS MODOS RAMAN DA L-ASPARAGINA MONOHIDRATADA

*Antônio Jeferson de Deus Moreno*

Universidade Federal do Maranhão - Departamento de Física

*Josué Mendes filho e Francisco Erivan de Abreu Melo*

Universidade Federal do Ceará - Departamento de Física

*José Antonio Sanjurjo*

UNICAMP - Instituto de Física Gleb Wataghin

Palavras-Chaves: anarmonicidade, parâmetros Raman

Vários modos normais de vibração da l-asparagina monohidratada ( $C_4N_2H_8O_3 \cdot H_2O$ ) apresentam comportamento anarmônico. Todos estes modos pertencem a estruturas ligadas por pontes de hidrogênio.

As larguras de linha e as frequências Raman destas bandas são ajustadas pelas equações

$$\Gamma(T) = A[1 + 2/(e^x - 1)] + B[1 + 3/(e^y - 1) + 3/(e^y - 1)^2] \quad 1$$

e

$$\Omega(T) = \omega_0 + C[1 + 2/(e^x - 1)] + D[1 + 3/(e^y - 1) + 3/(e^y - 1)^2] \quad 2$$

onde  $x$  e  $y$  possuem a forma  $f(\omega, T)$  e os termos anarmônicos cúbicos e quárticos são respectivamente os coeficientes  $A$  e  $B$  da equação 1 e  $C$  e  $D$  da equação 2. Estes modos vibracionais apresentam evolução linear em baixas temperaturas e evoluções de ordem superiores no limite de altas temperaturas. Uma das causas deste comportamento é a dependência entre as distâncias X-H e o valor das distâncias H...Y da ponte de hidrogênio. Outro motivo para as anarmonicidades é a existência de mecanismo de acoplamento entre os estiramentos N-H e O-H com os modos de estruturas do tipo N-H...O e C-O...H. Os elevados valores para as larguras de linha dos modos de estiramento N-H e O-H são produzidos pelas variações da constante de força  $K \propto AB$  que são produzidas pelas flutuações das pontes de hidrogênio. Os parâmetros Raman destas vibrações foram ajustados satisfatoriamente somente quando foram incluídas as anarmonicidades de terceira e quarta ordem. As relações  $B/A$  e  $D/C$  apresentam valores menores do que 0,2, indicando que os processos de quatro fônons são pequenos quando comparados aos processos de três fônons.

## CRISTALIZAÇÃO EM VIDROS FLUOROCOROINDATOS

Samuel Leite de Oliveira<sup>1</sup>, Kalyne Miazato<sup>1</sup>, José Renato J. Delben<sup>1</sup>, Angela A. T. Delben<sup>1</sup>,  
Younes Messadeq<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - MS  
Departamento de Física

<sup>2</sup>Instituto de Química - UNESP - Araraquara - SP

**Palavras-Chave:** vidros fluorocloroindatos, estabilidade térmica, nucleação

Atualmente, os vidros de fluoretos e fluorocloreto tornaram-se de grande importância, devido ao seu enorme potencial de aplicações optoeletrônicas (baterias de filmes finos, dispositivos eletrocromáticos,...) e ópticas (fibras ópticas utilizadas em telecomunicações, medicina, amplificadores ópticos e lasers, dispositivos para conversão de radiação infravermelha em luz visível, sensores térmicos,...).

Uma nova classe de vidros de fluoretos contendo  $\text{InF}_3$  ampliou ainda mais o limite multifrôn, passando a transmitir em maiores comprimentos de onda no infravermelho. A perda óptica teórica, ainda não alcançada em laboratório, é menor que a dos vidros de sílica. Pesquisas de novas composições e métodos de preparação vem sendo desenvolvidas no sentido de reduzir as perdas ópticas e aumentar a janela de transmissão.

Pesquisamos a influência de cloretos alcalinos em substituição ao  $\text{BaF}_2$  e  $\text{SrF}_2$  sobre a estabilidade térmica das composições  $20\text{ZnF}_2 - 40\text{InF}_3 - x\text{BaF}_2 - y\text{SrF}_2 - z\text{MCl}$  onde  $x+y+z=40$ , em mol % e  $M=\text{Li, Na e K}$ .

Por DSC (Differential Scanning Calorimetry) determinamos as temperaturas características  $T_g$  (temperatura de transição vítrea),  $T_x$  (temperatura de início de cristalização) e  $T_p$  (temperatura de pico de cristalização) destas composições. Construímos diagramas de domínio vítreo indicando a estabilidade térmica utilizando resultados de observação visual e os parâmetros  $S = (T_x - T_g)(T_p - T_x)/T_g$  e  $T_x - T_g$ .

As melhores composições foram observadas com inclusão de aproximadamente 10% de  $\text{LiCl}$  e  $\text{NaCl}$ . Observou-se pelas características térmicas obtidas por DSC que os parâmetros de estabilidade térmica utilizados não são perfeita ou facilmente aplicáveis no caso de cristalização não homogênea.

(PROPP/UFMS)

## ESTRUTURA DE VIDROS NIOBOFOSFATOS DE FERRO

J. A. de Magalhães Abreu, R. S. de Oliveira, J. A. C. de Paiva, C. A. C. A. Bezerra\* e A. S. B. Sombra

Departamento de Física, Laboratório de Ótica não Linear e Ciência dos Materiais, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, 60450 Fortaleza, Ceará, Brasil

\*Centro de Tecnologia, Universidade de Fortaleza UNIFOR  
Fortaleza, Ceará

**Palavras Chave:** Dieletricos, Condutividade

O estudo das propriedades de vidros a base de metais pesados como nióbio, titânio etc, tem despertado grande interesse na comunidade científica devido a grande potencialidade de utilização destes materiais em dispositivos optoeletrônicos. Recentemente Komatsu\* propôs o uso de vidros contendo microcristais ferroelétricos como um novo tipo de vidros ópticos não lineares. Recentemente nosso grupo de pesquisa \*\* observou a formação de  $\text{LiNbO}_3$  em vidros niobatos a base de Lítio dopados com pequena dopagem de ferro. Pretendemos dar continuidade no estudo deste problema tentando compreender a real participação do ferro na estrutura destes vidros niobatos. Diversos trabalhos reportados na literatura mostram que o equilíbrio  $\text{Fe}^{2+}$  e  $\text{Fe}^{3+}$  é de fundamental importância no entendimento da condutividade nestes materiais. Neste trabalho a série de vidros niobofosfatos  $[0.1\text{Nb}_2\text{O}_5.0.4\text{P}_2\text{O}_5.0.5\text{Li}_2\text{O}]_y\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $y=0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5$ ) foram preparados e estudados usando espectroscopia infravermelha, difração de raios X e condutividade AC e DC. A condutividade DC mostrou forte dependência com a concentração de ferro. Medidas de perda foram realizadas para o  $\text{Li}_2\text{O}$  e  $\text{P}_2\text{O}_5$  e observou-se que estão limitadas a 1mol%. Os resultados de Mössbauer mostram que a razão  $\text{Fe}^{2+} / (\text{Fe}^{2+} + \text{Fe}^{3+})$  esta associada diretamente ao mecanismo de condução. A absorção infravermelha e a difração de raios X indicam que microcristalitos de  $\text{LiFePO}_4$  é formado para amostras com altas concentrações de Fe ( $y=0.4$  e  $0.5$ ). Esta é uma forte indicação que  $\text{O}^{2-}$  desempenha um importante fator no processo de condução.

\* T. Komatsu J.Non Cryst. Solids 135(1991)105 \*\*EB de Araujo, JAC de Paiva e ASB Sombra J.Phys. Condens. Matter 7(1995)9723

## MODIFIED Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-La<sub>2</sub>S<sub>3</sub> BASED GLASSES FOR 1.3 MICRON Pr<sup>+3</sup> - DOPED FIBER AMPLIFIER

*J.A.Medeiros Neto, N.Aranha and L.C.Barbosa*

L.M.V - IFGW - UNICAMP - P.O. Box 6165 - Campinas - SP - CEP 13081-970

*O.L.Alves*

LQES - IQ - Unicamp - P.O. Box 6154 - Campinas - SP - CEP 13081-970

*Palavras-Chaves:* Amplifier, Chalcogenide Glass

The optical properties of praseodymium-doped glasses have attracted considerable attention recently for their potential application as a 1.3 micron optical amplifier. As a result, novel glass composition are being developed and assessed. Among these, sulphide glasses based on Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-La<sub>2</sub>S<sub>3</sub> attracted attention as a promising alternate host for the rare-earth praseodymium, with quantum efficiencies exceeding 50 % on bulk sample. In the scientific literature, no reports of a chalcogenide glass based on Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-La<sub>2</sub>S<sub>3</sub> drawn into fibre form for telecommunications applications appear. In this paper, we present a modified Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-La<sub>2</sub>S<sub>3</sub> based glasses, a new technique of fabrication of these glasses and the progress towards the realisation of single-mode fibre based on this novel system.

(CNPq - CPqD Telebrás)

## STUDY OF CRYSTALLIZATION IN IRON TELLURITE GLASS USING IR TRANSMISSION METHOD

*R. F. Cuevas; V. C. S. Reynoso and L. C. Barbosa*

Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970, Campinas S.P.

*Palavras-chave:* Nonlinear glasses, glass kinetic crystallization, tellurite glasses

Tellurite glasses have optical non-linearity, high transparency in the visible to IR region and relatively low glass transition temperature  $T_g$  is of advantage for the preparation of so-called advanced materials. Crystallization of the TeO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>-Li<sub>2</sub>O-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glass causes drastic change of transmittance  $T$  in the IR transmission spectra. These change were utilized for investigating the crystallization of glasses when combined with the Johnson-Mehl-Avrami (JMA) equation. The IR transmission spectra were recorded on a IR spectrometer Jasco IR-700 with a small unpolished sample of 1 mm of thickness. Isothermal annealing of iron tellurite glass was carried out at different temperatures above  $T_g$ . Since the reduction rate of  $T$  is proportional to the degree of crystallization rate it can be related to the decreased fraction  $x$  of  $T$ , therefore:

$$x = (T_0 - T_t) / (T_0 - T_f)$$

where  $T_0$  is the original  $T$  at the transmission edge at  $t=0$ ,  $T_t$  is the transmittance at  $t=t$  and  $T_f$  is the minimal transmittance obtained at the final stage of crystallization. In the case of isothermal annealing JMA equation is useful for the Kinetic study of crystallization, therefore:

$$\ln\{-\ln(1-x)\} = n \ln t + \ln k$$

in which  $n$  is the Avrami index indicating the mechanism of crystallization and  $t$  the time of annealing. The JMA plot of glass gave the  $n \approx 1,0$  and  $1,5$  in the isothermal annealing at 360 °C and 390 °C. These results suggest that the crystallization is initiated at the surface of the glass sample and proceeds in a two or three dimensional manner by the diffusion process and indicate that the IR transmission method combined with the JMA equation is very effective for investigating the kinetics and mechanism of crystallization of a glass sample.

(PADCT, TELEBRAS, CNPq e FAPESP)

## FOTOLUMINESCÊNCIA DE ESTADOS LIGADOS NA BANDA DE SEPARAÇÃO SPIN-ORBITA EM PONTOS QUÂNTICOS AUTO-ORGANIZADOS DE $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

S. W. da Silva\*, Yu. A. Pusep, J.C. Galzerani, D. I. Lubyshev\*, P.P.González-Borrero\*, P. Basmaji\*  
Universidade Federal de São Carlos - Depto. de Física, C.P. 676, 13565-905, São Carlos-SP.  
\*Instituto de Física de São Carlos -USP, C.P. 369, 13560-970, São Carlos-SP

**Palavras-Chaves:** Pontos Quânticos, Separação Spin-Orbita, Fotoluminescência

Pontos Quânticos (QD) auto-organizados de semicondutores são formados durante o crescimento heteroepitaxial de compostos com parâmetros de rede muito diferentes, como  $\text{InGaAs/GaAs}$ ,  $\text{AlInAs/GaAs}$ . Até o momento, somente transições entre os estados ligados da banda de condução e os estados ligados da banda de valência foram detectados. Contudo, em estruturas perfeitas, como no caso dos QD auto-organizados, o tempo de vida dos elétrons e buracos foto-criados torna possível o uso da Fotoluminescência (PL) para o estudo de excitações eletrônicas com energias mais altas. Neste trabalho usamos a PL para investigar os estados eletrônicos confinados na banda de separação spin-orbita dos QD de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  embebidos no GaAs. As amostras usadas foram crescidas por MBE pelo método de Stranski-Krastanow sobre substrato de GaAs orientado na direção [111]. As concentrações de Índio foram de  $x = 0.5$  e  $1$ . Os espectros de PL foram realizados com energias de excitação próxima e fora da ressonância com a banda de separação spin-orbita. Os espectros de PL dos QD com concentrações  $x = 0.5$  e  $1$  medidos com energia de  $1.902$  eV (próximo à ressonância) apresentaram respectivamente linhas em  $1.65$  eV e  $1.72$  eV, as quais atribuímos a recombinâncias dos elétrons nos estados ligados na banda de condução com os buracos confinados na banda de separação spin-orbita. O espectro de PL fora da ressonância revelou linhas originadas de recombinâncias de elétrons do estado ligado na banda de condução com buracos confinados nos estados ligados de buraco pesado na banda de valência. Para determinar as energias de recombinação nos QD calculamos os auto-valores do estado fundamental para poços quadrados tridimensionais. Boas correspondências foram obtidas entre as energias de recombinação medidas e calculadas (usando parâmetros do "bulk") para a amostra com  $x = 0.5$ . Entretanto, um pequeno deslocamento da energia de recombinação para a amostra com  $x = 1$  foi encontrado. Neste caso, os valores exatos das energias de recombinação podem ser obtidos com o uso de parâmetros que considerem a tensão no QD de InAs. Assim, nenhuma influência do tensão nas energias de recombinação do QD de  $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  foi detectada, enquanto que o QD de InAs revelou um deslocamento de pico de PL, o qual pode ser atribuído ao efeito da tensão.

## CORRELATOR PARAMÉTRICO DE PICOS DE CONDUTÂNCIA EM PONTOS QUÂNTICOS CAÓTICOS

Henrik Bruus\*, Caio H. Lewenkopf† e Eduardo R. Mucciolo ‡

\* CNRS-CRTBT, Grenoble, França

† Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

‡ NORDITA, Copenhague, Dinamarca

**Palavras-Chave:** pontos quânticos, caos, bloqueio coulombiano

Uma das principais características dos pontos quânticos no regime coulombiano é a existência de picos bastante estreitos e bem separados nas curvas de condutância versus tensão de base. Neste trabalho nós propomos que o correlator das alturas dos picos de condutância em função de um parâmetro externo genérico pode ser usado como uma ferramenta para o estudo da dinâmica caótica dos elétrons confinados no ponto quântico. Esse correlator pode ser facilmente obtido experimentalmente; sua largura de decaimento pode ser estimada semiclassicamente e está intimamente ligada à natureza do movimento eletrônico. O limite assintótico da curva foi calculado usando a teoria de matrizes aleatórias e o restante foi determinado através de simulações numéricas. A expressão final é independente de detalhes do sistema (é universal), uma vez reescalada apropriadamente. Nós confirmamos os nossos resultados comparando-os com uma diagonalização numérica exata do bilhar conforme perfurado por uma linha de fluxo magnético variável.

(European Commission e National Science Foundation, E.U.A)

## HIGH INDEX ORIENTATION EFFECTS OF STRAINED SELF-ASSEMBLED InGaAs QUANTUM DOTS

*P.P.González-Borrero, E.Marega Jr., A. C. Notari, D.I.Lubyshev,  
E.Petitprez and P.Basmaji*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

**Palavras-Chave:** semiconductor, quantum dots, high-index

In this work we report substrate orientation effects on optical properties of self-organized InGaAs QD. QD structures were grown by MBE on the (100) and (n11), where n is 1, 2, 3, 5 and 7, GaAs substrates mounted on the same substrate holder. The structure includes 0.5 $\mu$ m GaAs buffer, 3 nm In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As reference quantum well (QW), separated by 100 nm GaAs layer from In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As QD and 50 nm GaAs cap layer. InGaAs growth rate was determined by RHEED oscillations as 0.4 ML/s. The growth mode was 2D during the deposition of the first 7 monolayers and after was transferred to Stranski-Krastanow mode.

PL spectra of reference QW's in all directions show similar intensity and wavelength peak positions. Contrary to the QW, the QD shows strong orientation effect in the amplitude, integral luminescence, peak position and peak shape from PL spectra. We believe that these characteristics are related to the differences of growth kinetic and defects densities on InGaAs/GaAs heterointerface due to the properties of high index planes. The 63 and 59 meV PL-FWHM observed in the (100) and (311)B respectively, shows that integral PL ratio between QD/QW is about 6 in the case of (100) and about 1.5 for (311). QD PL spectra grown on high index planes have higher intensity and a broader peak due to the wider distribution of dots sizes. We believe that the presence of high steps density on such surfaces suppress the In adatoms migration and reduce the stress-related defects in the InGaAs/GaAs heterointerface.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## ESTADOS ELETRÔNICOS UNIDIMENSIONAIS EM HETEROJUNÇÕES DE $n - Al_xGa_{1-x}As / GaAs$ , CORRUGADAS COM DOPAGENS MODULADAS

*Salviano A. Leão*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Marcos Henrique Degani*

Instituto de Física de São Carlos - USP

**Palavras-Chave:** fios quânticos, estados eletrônicos, propriedades eletrônicas

Estudamos os efeitos da corrugação periódica da interface da estrutura  $n - Al_xGa_{1-x}As / GaAs$  na densidade eletrônica ao longo desta interface. A forma geométrica desta interface é do tipo dente de serra. Nas camadas de inversão convencionais, os elétrons estão distribuídos uniformemente ao longo da interface plana da heteroestrutura, devido a forma dente de serra desta nova estrutura, os elétrons se distribuem de maneira não uniforme ao longo da interface, produzindo um gás de elétrons quase-unidimensional. A estrutura que investigamos possui um período de 806 Å e uma densidade residual uniforme de impurezas aceitadoras da ordem de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Calculamos a estrutura eletrônica do gás de elétrons quase-unidimensional confinado na interface corrugada em função da voltagem aplicada ao *gate*, da densidade de impurezas doadoras e da temperatura. As equações de Schrödinger e Poisson são resolvidas autoconsistentemente. O método usado para calcular a estrutura eletrônica deste sistema é baseado na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo usando a técnica do *Split-Operator*. Os resultados obtidos para a densidade eletrônica mostram que, dependendo da densidade de impurezas doadoras, haverá a formação de um gás de elétrons quase-unidimensional nas regiões côncavas ou convexas do *GaAs*.

(FAPESP, Centro Nacional de Supercomputação - UFRGS)

## EVIDÊNCIA EXPERIMENTAL DA REORIENTAÇÃO DE SPINS NA SUPERFÍCIE DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS ESFÉRICAS

*Andris Figueiróa Bakuzis<sup>1</sup>, Paulo César de Moraes<sup>1</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>2</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: anisotropia de superfície, ressonância magnética, nanopartículas magnéticas*

Diversas aplicações tecnológicas têm surgido de propriedades decorrentes da redução de uma ou mais dimensões em materiais. Além disso, a possibilidade de produção e utilização de materiais mesoscópicos tem permitido uma maior compreensão dos efeitos decorrentes da redução da dimensionalidade. Dentre os materiais mesoscópicos estão as partículas magnéticas (monodomínios magnéticos) que dispersas num líquido carreador, na forma de suspensões coloidais ultra-estáveis, formam os chamados líquidos magnéticos. Neste trabalho, amostras de fluidos magnéticos contendo nanopartículas de ferrita de manganês, com diferentes diâmetros médios, foram estudadas por ressonância magnética. A constante de anisotropia magnetocristalina efetiva de uma partícula isolada é obtida em função da temperatura e em função do diâmetro médio. A concentração de partículas magnéticas suspensas no líquido carreador foi mantida num nível (da ordem de  $2 \times 10^{16}$  partícula/cm<sup>3</sup>) de forma a eliminar a possibilidade de interação dipolar entre partículas. Na faixa de temperaturas estudada, a anisotropia magnetocristalina efetiva é diretamente proporcional ao diâmetro das nanopartículas, sendo menor em módulo que o valor para o bulk, decresce (em valor absoluto) com o aumento da temperatura. As contribuições volumétrica e superficial da anisotropia magnética são analisadas separadamente, permitindo obter o comportamento da anisotropia magnética superficial. Os dados experimentais revelam uma mudança de sinal para a anisotropia magnética superficial, interpretado como uma mudança orientacional dos momentos magnéticos na superfície da partícula. Essa mudança orientacional, identificada como uma transição de fase, já foi observada em filmes magnéticos e pela primeira vez é verificada em nanopartículas magnéticas esféricas. Os resultados mostram que a temperatura de transição é dependente do diâmetro médio das nanopartículas, ocorrendo a uma temperatura maior para amostras de menor diâmetro.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## MEDIDAS DE CAPACITÂNCIA EM CAPACITORES PREENCHIDOS COM MISTURAS DE AOT<sup>1</sup>/DODECANOL/H<sub>2</sub>O

*M. Magalhães - A.M.Figueiredo Neto*

Instituto de Física da USP- Departamento de Física Experimental

*Palavras-Chaves: transições de fase, propriedades elétricas*

Cristais líquidos liotrópicos são misturas de moléculas anfífilicas em um solvente (em geral água) que apresentam algum grau de ordem orientacional dependendo da temperatura e concentrações relativas dos constituintes. Em cristais líquidos liotrópicos nemáticos as unidades básicas são agregados de moléculas anfífilicas, chamadas micelas. Nessas misturas são conhecidas micelas diretas que possuem a região polar das moléculas anfífilicas voltadas para o exterior das micelas, em contato com o solvente (água), enquanto que a parte apolar está no interior das micelas. As micelas reversas são aquelas em que há uma inversão da orientação das moléculas anfífilicas. A polarização de materiais compostos de várias substâncias dependerá da polarização de cada um de seus componentes. Desta forma a polarização total do material dependerá das concentrações relativas do composto. Inserindo misturas de AOT/DOD/H<sub>2</sub>O em um capacitor, mantendo uma diferença de potencial constante, poderemos obter medidas de capacitância em função da concentração (à temperatura entre 24 - 28°C). Estas medidas proporcionam determinar as concentrações de transição de estruturas direta - reversa, auxiliando o mapeamento em diagramas de fases através de observação de texturas em microscópios ópticos de luz polarizada e padrões de difração de raios X. Fizemos as medidas de capacitância em função da razão K entre a concentração molar de água e anfílico (AOT+dodecanol). Ao aumentarmos a concentração de água, mantendo a de AOT aproximadamente constante e igual a 20%, o valor de capacitância aumenta, apresentando um salto quando  $K \cong 1$ . Neste ponto pode estar ocorrendo uma inversão na estrutura: passando de uma estrutura reversa para uma direta. As medidas de capacitância se mostraram eficientes para a determinação da inversão de estrutura reversa para a direta. Devem ainda ser feitas mais medidas relacionando-as às medidas de distância interplanar através de difração de raios X.

(CNPq)

<sup>1</sup> AOT= bi -2- etil hexil sulfocssucionato de sódio

## UM CONTADOR DE NÚCLEOS DE CONDENSAÇÃO DE NUVENS POR IMAGENS

KLEITON DO CARMO MENDES

Fundação Cearense de Meteorologia e Recursos Hídricos - FUNCEME

CARLOS JACINTO DE OLIVEIRA

Departamento de Física e Química da Universidade Estadual do Ceará - UECE

MURILO PEREIRA DE ALMEIDA e JOSÉ CARLOS PARENTE DE OLIVEIRA

Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará - UFC

A concentração de gotículas de nuvens é de fundamental importância na determinação das propriedades radiativas das nuvens, assim como na evolução de suas precipitações. Medidas de Núcleos de Condensação de Nuvens (NCN), que fornecem considerável predicabilidade a respeito das características das nuvens, podem ser obtidas por ativação direta dos NCN em uma câmara com supersaturação controlada. Medidas diretas de NCN podem ser obtidas com um Contador de Núcleos de Condensação de Nuvens (CNCN) cujo principal componente é a Câmara de Difusão de Gradiente Térmico Estático. Estes contadores são úteis para medir as concentrações de gotículas no intervalo de supersaturação 0,2% até 1,2%. Dois métodos são tradicionalmente utilizados na determinação da concentração: a contagem direta das imagens das gotículas e a medida da luz espalhada pelas gotículas. A contagem direta é feita em um sistema de vídeo ou em fotografias. Este método tem a vantagem de ser independente dos tamanhos das gotículas. Contudo, a contagem é enfadonha e consome muito tempo. A medida indireta da luz espalhada pelas gotículas levam a uma conveniente automação, com o custo de introduzir incertezas adicionais: a luz espalhada é proporcional ao número total de gotículas vezes sua seção de choque de espalhamento, e não somente ao número de gotículas! Como consequência o procedimento de calibração destes contadores não é uma tarefa simples (de Oliveira, J.C.P. and G. Vali, 1995). Neste trabalho um novo método de calibração para os CNCN, assim como um novo contador são descritos. O novo método utiliza técnica stocástica de processamento de imagens digitais. Neste método as imagens das gotículas na câmara de difusão são digitalizadas. As gotículas são contadas por um algoritmo que conta e classifica círculos pelo tamanho. Este algoritmo é baseado no modelamento de imagens digitais pelo Campos Aleatórios de Markov, e sua implementação utiliza o esquema de Annealing Simulado via as regras de Metropolis (Carnevali, et al., 1985, Metropolis, et al., 1953). Nossa avaliação do algoritmo consiste em comparar seus resultados com a contagem visual das gotículas. Para uma escolha aleatória de 39 imagens o coeficiente de correlação entre os dois métodos de contagem foi de 0,94. Este novo método dispensa resultados a necessidade de calibrar os CNCN: eles tornam-se contadores absolutos". Adicionalmente, este novo método, além de contar as gotículas, classifica-as por tamanho. O novo contador de NCN não necessita um fotodetector, desde que ele é um detector de imagens.

## DE UMA MOLÉCULA A UMA MICELA VIA PRINCÍPIO DE CORRESPONDÊNCIA

J.N. Maki

*Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física*

A.M. Figueiredo Neto

*Universidade de São Paulo, Instituto de Física*

*Palavras-chave:* "mesophase", "soliton" e "quanta".

Construímos um modelo, onde uma caixa unidimensional, com uma partícula pontual simula uma molécula. Enfileiramos idênticas caixas encostadas umas às outras, formando uma cadeia de  $N$  moléculas. Definimos este agregado de moléculas como sendo uma micela. Foi postulado que micela é um estado solitônico. A essência do conceito de soliton é definida como sendo um agregado de  $N$  moléculas, tendo uma energia total interna sempre balanceada pela externa, de modo que seu perfil físico-geométrica se mantenha sempre invariável. Os níveis de energia que a partícula dentro da caixa possa obter simula a força interna da molécula. Neste modelo, a energia interna considerada é totalmente cinética. A força externa sempre compensa todas as forças internas mantendo constantemente todas as moléculas enfileiradas. Esta provém do meio denominado cristal-líquido liotrópico onde sobrevive a nossa micela. As paredes da caixa representam uma terceira força: a força efetiva interna de vínculo. As distâncias entre as paredes estão relacionadas ao comprimento da molécula, portanto, ao grau de liberdade unidimensional. É justamente nesse grau de liberdade que a dinâmica com efeito *quanta* de energias se manifestará, de modo que impeça perda de energia por irradiação, entre tantas outras que possam quebrar o conceito de estado solitônico. Como conclusões deste estudo, os resultados apresentados pelo modelo nos mostraram um novo caminho e novas concepções para desvendar as transições mesofásicas. Elucidou de que forma a força de "squeezing" externa atua, dando origem a um efeito "scaling" quântico. Mais ainda, como as visualizações de auto-similaridades e suas dimensões fractais ajudam nesse tipo de discernimento teórico. Enfim, esperamos, via princípio de correspondência e técnicas de soliton, que seja possível desvendar ainda mais outros efeitos em cristais-líquidos liotrópicos, procurando doravante construir modelos particularmente mais sofisticados e realísticos.

## A GENERALISED PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR FITTING SHARP PEAKS IN POLYMER ELECTROLYTES CONDUCTIVITY

*A.L. de Oliveira and P.R. Silva*

Departamento de Física, ICEx, UFMG, C. P. 702, C.E.P. 30161-970, Belo Horizonte, M.G., Brazil

*C.L. Sangiorge\* and O. de O. Damasceno\*\**

Departamento de Química\* - Departamento de Física\*\*, CEFET, Av. Amazonas 5253, C.E.P. 30180-001, Belo Horizonte, M.G., Brazil

*A.L. Silva*

Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFMG, Rua Espírito Santo 35, sala 613, C.E.P. 30.160-030, Belo Horizonte, M.G., Brazil

**Palavras-chave:** Phenomenological model, Ionic Conductivity, Polymer Electrolyte

We propose a generalised phenomenological model which takes as starting point relaxation time, as it appears in Drude-like models. From equation  $F = \frac{1}{2}a(n - n^*)\Psi^2 + \frac{1}{p}b\Psi^p$ , where  $F$  is the Gibbs free energy,  $a$  and  $b$  are constants,  $n$  is the salt concentration,  $n^*$  its critical concentration,  $\Psi$  is the amplitude of instability mode and  $p$  is any whole or not whole positive number  $> 2$ , and considering the Landau-Khalatnikov equation,  $\frac{d\Psi}{dt} = -\Gamma \frac{\partial F}{\partial \Psi}$ , where  $\Gamma$  is a constant, we have arrived, after some algebraic manipulations, to the following final equations:  $\rho = \rho_c(T) + k(T)(n - n^*)$ , for  $n > n^*$ , and  $\rho = \rho_c(T) + k(T)(p - 2)(n^* - n)$ , for  $n < n^*$ , where  $\rho$  is the global resistivity and  $\rho_c$  is the resistivity of the crystalline phase.

Our model fits well resolved sharp peaks in conductivity versus salt concentration diagrams for polymer electrolytes we have studied. (FAPEMIG, FINEP, CNPq)

## RAMAN SCATTERING STUDY OF MCIO<sub>4</sub>/POLY(ETHYLENE GLYCOL - 400) DISTEREATES

*C.L. Sangiorge\* and O. de O. Damasceno\*\**

\*Departamento de Química - \*\* Departamento de Física, CEFET, Av. Amazonas 5253, C.E.P. 30180-001, Belo Horizonte, M.G., Brazil.

*A.L. Silva*

Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, UFMG, Rua Espírito Santo 35, sala 613, C.E.P. 30.160-030, Belo Horizonte, M.G., Brazil.

*M.A. Pimenta, R.A. Silva and A.L. de Oliveira*

Departamento de Física, ICEx, UFMG, Caixa Postal 702, 30161-970, Belo Horizonte, M.G., Brazil

**Palavras-chave:** Raman Scattering, MCIO<sub>4</sub>/Poly(Ethylene Glycol) Distereates

We show and discuss in the present work Raman scattering data we have obtained in studying uncomplexed poly(ethylene glycol-400) distereate (PEGD) samples and PEGD - MCIO<sub>4</sub> complexes at different salt concentrations where  $M = \text{Li, Na}$ .

In both cases: (i) wide peaks we have observed at about 300 cm<sup>-1</sup> are originated by a superposition of host polymer acoustic vibration modes. The gradual broadening they suffer by increasing salt concentration is an indication of transition to states of higher degrees of conformational disorder; (ii) three bands, centred respectively at 460 cm<sup>-1</sup>, 624 cm<sup>-1</sup> and 932 cm<sup>-1</sup>, were attributed to internal vibration modes of perchlorate anions. Special care was used for fitting 932 cm<sup>-1</sup> bands and it was possible to distinguish concentration ranges where there is formation of ion-pairs.

Bands observed at about 862 cm<sup>-1</sup> and 864 cm<sup>-1</sup> respectively for PEGD - LiClO<sub>4</sub> and PEGD - NaClO<sub>4</sub> complexes were attributed to "breathing" metal-Oxygen modes. (FAPEMIG, FINEP, CNPq)

## ANÁLISE DA TENSÃO MECÂNICA RESIDUAL EM EXAMETILDISSILOXANO POLIMERIZADO A PLASMA POR REFLEXÃO ÓTICA

*Sheila Maria Del Nery, Rita de Cássia Domingos, Carlos Eduardo Silva de Amorim,  
Rogério Pinto Mota, Maurício Antonio Algatti*

Departamento de Física e Química da Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá - UNESP  
CEP 12500-000 - Guaratinguetá, S.P

*Palavras-Chave:* polímero, tensão mecânica, filme fino

A estabilidade mecânica (em particular a adesão) de um polímero orgânico a uma superfície, além de depender das condições de limpeza da superfície, está intimamente ligada à tensão residual interna no polímero, o que pode provocar trincas ou deslocamento do filme na superfície; a tensão tanto depende das condições de deposição do polímero (potência elétrica, pressão e fluxo de vapores e gases no reator), bem como das condições ambientais. Neste trabalho, estudou-se a variação da tensão mecânica em função do tempo de exposição do polímero às condições atmosféricas. Os filmes finos foram depositados num reator cilíndrico medindo 40cm de comprimento por 20cm de diâmetro; o plasma tomou lugar entre dois eletrodos circulares e de placas paralelas, alimentados por corrente contínua (de 600 a 1000V) e pressão de operação de 0,6 mbar a 1 mbar. A espessura dos filmes depositados, medida por microscopia interferométrica, revelou valores entre 2000 Å e 5000 Å. As medidas de tensão mecânica residual interna no Hexametildissiloxano (HMDSO) polimerizado sobre laminulas de vidro de dimensões 30x3x0,15 mm<sup>3</sup> foram feitas através da técnica da deformação do substrato, por reflexão ótica, usando um feixe de laser de He-Ne incidente sobre o conjunto filme/substrato. A evolução temporal de tensão residual interna, medida após a deposição, decresceu nas primeiras horas até que passou a se manter constante (6 horas após a deposição para o filme depositado com pressão de 0,6mbar). Neste intervalo, houve uma queda no valor medido da tensão, variando de  $7 \times 10^7$  a  $1 \times 10^7$  Pa.

## MATERIAIS SUPERCONDUTORES: BREVE INTRODUÇÃO E REVISÃO

*Oscar Ferreira de Lima*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp, Campinas, SP

Milhares de materiais supercondutores já foram identificados, desde a descoberta deste fenômeno em 1911. Nos últimos dez anos o estudo de várias famílias de cupratos de alta temperatura crítica ( $T_C \geq 100$  K) tem dominado a área. Nestes novos materiais a ocorrência de planos de  $\text{CuO}_2$ , em estruturas fortemente anisotrópicas, é geralmente correlacionada com os altos valores de  $T_C$  e com o mecanismo microscópico da supercondutividade. Suas propriedades macroscópicas são bem similares as dos supercondutores do tipo II convencionais, de baixa  $T_C$ ; por exemplo, apresentam o estado de rede de vórtices, cuja dinâmica é bem descrita pela teoria de Ginzburg-Landau. Entretanto, os efeitos devido a flutuações térmicas e quânticas são relevantes, determinando a manifestação de novas fases como o *líquido de vórtices* e o *vidro de vórtices*.

No campo das aplicações tecnológicas só recentemente começaram a ser divulgados resultados concretos, principalmente envolvendo o uso de junções (ex. SQUID) e pequenos comprimentos ( $< 10$  m) de cabos para o transporte de alta densidade de corrente elétrica ( $J_c \geq 10^5$  A/cm<sup>2</sup> em  $T = 77$  K e  $H \leq 10$  kOe).

Nesta palestra será apresentada uma introdução e revisão das principais idéias e fatos experimentais sobre os supercondutores, com ênfase nos cupratos de alta  $T_C$ . Um panorama da pesquisa em supercondutividade no Brasil também será apresentado.

(FAPESP, CNPq)

## VERY THIN Fe/Ni MODULATION MULTILAYER FILMS UNDER ION IRRADIATION

L. Amaral<sup>a</sup>, M. E. Brückmann<sup>a</sup>, A. Paesano Jr.<sup>a</sup>, R.B. Scorzelli<sup>b</sup>, T. Shinjo<sup>c</sup> and N. Hosoi<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Instituto de Física - UFRGS, C.P. 15051 91501-970 Porto Alegre RS, Brazil  
<sup>b</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Xavier Sigaud, 150 22290-180 RJ, Brazil  
<sup>c</sup>Institute for Chemical Research, Kyoto University, Uji, Kyoto -Fu 611, Japan

**Palavras-chave:** *FeNi multilayers, ion mixing, Mössbauer*

We investigated the effect of noble gas irradiation on iron-nickel multilayers with total thickness of 1020 Å, and a very thin modulation  $\Lambda = 3.3 \text{ \AA Fe} + 1.8 \text{ \AA Ni}$ , that means  $200 \times [\phi_{\text{Fe}} = 3.3 \text{ \AA} / \phi_{\text{Ni}} = 1.8 \text{ \AA}]$  or a nominal composition  $\text{Fe}_{0.63}\text{Ni}_{0.37}$ . The films were irradiated using He, Ne, Ar and Xe ions and doses in the range  $10^{15}$  -  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup>. The characterization of the phases present in the as-deposited and irradiated samples was done using Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy (CEMS). The as-deposited sample reveals two magnetic components: the characteristic  $\alpha$ -Fe and a second field around 30 T. The Ne irradiations for doses higher than  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> produce two other components: the first one is an atomically ordered phase, evidenced in the CEMS spectra by a magnetic field of 29 T and the second one is a non-magnetic phase. The increase of this non-magnetic phase seems to be saturated at dose of  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup>. Mixing with He, even at doses as high as  $10^{17}$  ions/cm<sup>2</sup>, produce only a small fraction of the non-magnetic phase. In the case of the irradiation of Ar and Xe a large distribution of magnetic field are produced. These CEMS results of the irradiated samples are in agreement with those obtained in our previous investigation done on bulk samples at Invar region. A remarkable effect results when the samples are submitted to a sequential bombardment. For samples previously implanted with Ne the non-magnetic phase (associated with Ne implantation) is completely destroyed by Xe ions. On the other hand, when we changed the order of implantation, i.e., the sample is first implanted with Xe and then bombarded with Ne, no modifications appear in the CEMS spectrum.

(CNPq, FINEP, FAPERGS)

## FORMAÇÃO DE SILICETOS DE FERRO POR REAÇÃO DE FILME FINO DE Fe COM SUBSTRATO DE Si INDUZIDA POR IRRADIAÇÃO DE Xe

Denis Luis de Paula Santos\*, Joel Pereira de Souza+, Livio Amaral+ e Henry Boudinov+

\*Universidade Federal de São Carlos - SP e-mail: ddls@power.ufscar.br  
+Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS

**Palavras-Chave:** silicetos, irradiação iônica, filme fino

Apresentamos neste trabalho um estudo da formação de silicetos de ferro obtidos por reação de filme fino de ferro com substrato de silício, induzida através de mistura por irradiação iônica. As amostras consistiram de filmes finos de ferro com espessura de 40 nm depositados por evaporação de Fe, induzida por canhão de elétrons com uma taxa de deposição de 0,1 nm/s, em substratos de Si com orientação (100) e resistividades de 1  $\Omega$ .cm a 4  $\Omega$ .cm. Em seguida as amostras foram irradiadas às temperaturas de -120 °C, 20 °C, 170 °C, 220 °C, 300 °C e 400 °C com feixe de xenônio ( $\text{Xe}^+$ ) com energia de 380 keV, densidade de corrente de ions  $\leq 0,5 \mu\text{A/cm}^2$  e doses variando de  $0,2 \times 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> a  $2 \times 10^{16}$  cm<sup>-2</sup>. As amostras foram analisadas com espectroscopia de retroespalhamento Rutherford (RBS), espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão (CEMS) e difração de raios-X (XRD). Sob irradiação iônica à temperaturas abaixo de 160 °C a mistura é governada por mistura balística na cascata. Acima desta temperatura os efeitos de difusão auxiliada por danos de radiação passam a predominar no processo de mistura. Obtém-se as fases  $\text{Fe}_3\text{Si}$ ,  $\text{FeSi}$  e  $\beta\text{-FeSi}_2$ , sendo que a última delas é a mais abundante em amostras irradiadas à temperaturas abaixo de 300 °C. A 400 °C forma-se adicionalmente a fase  $\alpha\text{-FeSi}_2$ . Neste caso as fases mais abundantes são as  $\text{Fe}_3\text{Si}$  e  $\text{FeSi}$ . Observou-se comportamento semelhante do processo de mistura para amostras com substratos de Si com orientações  $\langle 111 \rangle$  e  $\langle 100 \rangle$ .

## BOMBARDEIO DE SÓLIDOS POR AGREGADOS DE ALTA ENERGIA

*K. Baudin<sup>a</sup>, A. Brunelle<sup>a</sup>, S. Della-Negra<sup>a</sup>, D. Jacquet<sup>a</sup>, P. Hakansson<sup>b</sup>, Y. Le Beyec<sup>a</sup>, M. Pautrat<sup>a</sup>,  
R. R. Pinho<sup>c</sup>, Ch. Schoppmann<sup>d</sup>*

<sup>a</sup> Institut de Physique Nucléaire (IPN), Orsay, France; <sup>b</sup> Department of Radiation Science, Uppsala University, Sweden; <sup>c</sup> Physics Department, PUC-Rio, Brazil;

<sup>d</sup> Physik Institut, Univ. Erlangen, Germany

**Palavras-Chave:** agregados, valina, carbono, espectrometria de massa, tempo-de-vôo

O estudo das colisões de ions com sólidos é um tema vasto de pesquisa e de aplicações. Projéteis atômicos de vários tipos com energias de alguns keV a dezenas de MeV têm sido utilizados para bombardear diferentes tipos de alvos sólidos. Os átomos e moléculas emitidos das superfícies, os quais são analisados por meio da espectrometria de massa por tempo-de-vôo, permitem estudar as interações ions - sólidos. A recente utilização de agregados iônicos de alta energia permite ampliar este estudo. Por exemplo, feixes de C<sub>10</sub> de 4,2 MeV, 10,35 MeV e de 20,2 MeV e de C<sub>60</sub> de 20,2 MeV, produzidos no acelerador TANDEM de 15 MV de Orsay, foram utilizados para bombardear amostras de valina e amostras de carbono de diferentes espessuras. Apesar de apresentarem valores de perda de energia muito próximos, a emissão de agregados de valina do tipo (M<sub>n</sub> + H)<sup>+</sup>, com M = 117 u, utilizando os feixes de C<sub>10</sub> de 4,2 MeV é uma ordem de grandeza maior que utilizando os fragmentos de fissão do <sup>252</sup>Cf (100 MeV). Este fato decorre da proximidade entre as trilhas de ionização produzidas por cada átomo do agregado no interior do sólido criando uma região de alta densidade de energia. A proximidade é relevante para profundidades de até 300 nm, como resultado do bombardeio de C<sub>10</sub> de 10,35 MeV em alvos de carbono.

(CAPES)

## ESTUDO DA CINÉTICA DA TRANSFORMAÇÃO DE FASES EM FILMES FINOS, ATRAVÉS DE MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA *IN SITU*, DURANTE A IMPLANTAÇÃO IÔNICA.

*Rosalvo Mário Nunes Miranda, Marcos Antonio Zen Vasconcellos, Mario Norberto Baibich*  
Instituto de Física, UFRGS

*José Antônio Trindade Borges da Costa*

Departamento de Física, UFSM

**Palavras-chave:** Implantação Iônica, Resistividade Elétrica, Filmes Finos

Foram realizadas medidas de resistividade elétrica, à temperatura de 77K, em filmes finos homogêneos da fase β-NiAl com espessuras de 25; 37,5; 50; 62,5 e 75 nm, durante a irradiação com ions de Ar<sup>+</sup> com energia de 120 keV e correntes inferiores a 100 nA/cm<sup>2</sup>. As amostras foram expostas ao bombardeamento até doses de 2,5.10<sup>15</sup> ions/cm<sup>2</sup>, e foram analisadas por Difração de Raios-X, Microscopia Eletrônica e Retroespalhamento de Rutherford (RBS). Os resultados da resistividade foram obtidos em um criostato constituído especificamente para este fim. Todo o conjunto de resultados foi interpretado segundo três modelos diferentes. O primeiro destes é o modelo de Gibbons de duas fases, na forma originalmente apresentada. O segundo modelo é uma modificação proposta neste trabalho, onde é considerado um modelo semelhante ao Gibbons, de três fases e acrescido de um termo de dependência em profundidade dos aglomerados de danos. O terceiro modelo é um caso particular da *Teoria Estocástica da Cinética de Modificação de Sólidos Irradiados a Baixas Temperaturas com Partículas Atômicas* desenvolvida por Borges da Costa, também com a introdução de uma dependência da profundidade dos aglomerados de danos. A análise do conjunto de resultados obtidos sugere que:

- \* As transformações de fase de resistividade induzidas por irradiação estão relacionadas à deposição de energia e produção de defeitos na amostra.
- \* As transformações provocadas pela irradiação sugerem uma estrutura nos aglomerados de danos.
- \* A análise dos resultados revela ser indispensável a inclusão da dependência em profundidade dos efeitos de irradiação para a descrição completa dos fenômenos observados.

## FIBRAS DE $LiNbO_3$ COMO PONTA DE PROVA EM ÓTICA DE CAMPO PRÓXIMO DE ALTA RESOLUÇÃO

*Francisco E. G. Guimarães, Marcello R. B. Andreeta, Frederico Dias Nunes, Antônio Carlos Hernandes*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais  
Instituto de Física de São Carlos – USP

*Palavras-Chave:* Ótica de campo próximo, pontas óticas, "laser heated growth"

O velho sonho de se obter informação do mundo submicroscópico por meio de luz de determinada frequência tornou-se realidade nesta década através da ótica de campo próximo. Isto só foi possível devido ao avanço da tecnologia de produção de pontas de provas ultra finas a base de fibras óticas acopladas a um microscópio de varredura do tipo tunelamento (STM). Estes novos microscópios óticos de campo próximo por varredura (SNOM) possibilitam imagem, espectroscopia de alta resolução ( $\lambda/100$ ) e modificação de superfície com comprimentos de ondas no visível. Visando ampliar os limites de aplicação do SNOM, este trabalho propõe o uso de um novo tipo de ponta de prova a base de materiais cristalinos anisotrópicos, tais como o  $LiNbO_3$ . Com estas novas fibras temos a possibilidade de (a) utilizar um método alternativo não-ótico de controle da distância entre a ponta de prova e a amostra por meio da detecção piezoelétrica da interação entre as duas partes, (b) evitar despolarização parcial da luz nas pontas, permitindo um melhor contraste de polarização na detecção e formação de imagem e (c) detectar eletro-oticamente gradientes de campos elétricos superficiais. Um outro tipo de aplicação destas pontas eletro-óticas seria no campo de processos óticos fundamentais envolvendo o conceito de campo próximo. Dentre as múltiplas aplicações, temos a intenção de estender nossos estudos à ótica não linear de campo próximo. As pontas de prova monocristalinas de  $LiNbO_3$  estão sendo preparadas pela técnica "Laser Heated Pedestal Growth". Neste estágio do trabalho apresentaremos os primeiros resultados envolvendo os parâmetros de controle da morfologia na preparação, otimização e caracterização ótica e estrutural das pontas.

## ROTEADOR E INCORPORADOR DE MÚLTIPLAS PORTADORAS PARA REDES ÓPTICAS PASSIVAS

*S. Celaschi, J.T. Jesus*

CPqD-TELEBRÁS, 13.088-061 - Campinas - SP

*G. Nykolak*

Lucent Technologies, Bell Labs Innovations

600 Mountain Ave, Murray Hill, N.J. 07974

*Palavras-Chave:* Rede WDM, roteador óptico, comunicações óticas

De modo a explorar mais efetivamente a banda em torno de 1550 nm oferecida por uma rede de comunicações contendo múltiplas portadoras óticas (rede WDM), torna-se necessário adicionar (multiplexar) seletiva e localmente informação nas diversas portadoras óticas propagadas, e remover (demultiplexar) esta mesma informação nos locais desejados. Dispositivos óticos capazes de realizar estas funções sem causar interferência entre as portadoras são considerados atualmente componentes fundamentais para a implementação das redes WDM devido a sua capacidade de reutilização das frequências óticas. Estes dispositivos são conhecidos como ADMs ("Add Dropp Multiplexers) e têm sido construídos utilizando dispositivos óticos de tecnologias diversificadas e caras. As portadoras a serem retiradas em um determinado ponto de acesso devem possuir uma alta razão de rejeição de modo a permitir a reutilização do mesmo comprimento de onda para o transporte de novo fluxo de informação. Este trabalho descreve a concepção e implementação de um ADM para múltiplos comprimentos de onda onde a multiplexação/demultiplexação ocorre sem o uso de elementos óticos discretos ou dispositivos integrados sobre substratos planares. Tal roteador totalmente fabricado em fibra (reserva de patente solicitada) pode ser usado em cada nó de uma rede de múltiplas portadoras onde as funções de ADM são requeridas. Adicionalmente, tais dispositivos são intrinsecamente estáveis e de baixo custo de fabricação.

## CONVERSÃO ASCENDENTE DE ENERGIA DO INFRAVERMELHO PARA O AZUL EM FIBRAS SILICATAS DOPADAS COM Pr<sup>3+</sup>

L. H. Acioli, A. S. L. Gomes, Cid B. de Araújo  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

C. N. Ironside  
Department of Electronics and Electrical Engineering, University of Glasgow

**Palavras-Chave:** fibras ópticas, terras raras, conversão ascendente de energia

Neste trabalho estudamos um novo processo de conversão ascendente de frequência por transferência de energia entre pares de íons de Pr<sup>3+</sup> dentro de uma fibra óptica de vidro silicato. Utilizamos um único feixe de bombeamento no infravermelho próximo (1.064 μm) proveniente de um laser de Nd:YAG (ML ou QSML). Realizamos medidas tanto no domínio temporal quanto no domínio espectral.

Observamos uma emissão em ≈ 475 nm da transição do estado <sup>3</sup>P<sub>0</sub> para o estado fundamental <sup>3</sup>H<sub>4</sub>. O comportamento desta emissão com a potência de bombeamento foi determinada experimentalmente, obtendo uma dependência quadrática. Também foram observadas as transições <sup>3</sup>P<sub>0</sub>→<sup>3</sup>F<sub>2</sub> (650 nm) e <sup>1</sup>D<sub>2</sub>→<sup>3</sup>H<sub>4</sub> (620 nm). Foram estudados os comportamentos temporais das emissões em 620 nm e 475 nm, tendo sido medidos tempos de decaimento de ≈ 170 μs e 300 μs, respectivamente. O primeiro é compatível com o tempo de vida de <sup>1</sup>D<sub>2</sub>, enquanto o segundo é muito superior ao tempo de vida do estado <sup>3</sup>P<sub>0</sub>. Mudanças drásticas na dinâmica foram observadas quando a intensidade do laser é superior a uma certa intensidade crítica, I<sub>c</sub>, sugerindo que emissão estimulada está presente. Também foram realizadas medidas usando ambos os feixes infravermelho e o segundo harmônico do laser de Nd:YAG. Apresentamos um modelo para descrever os resultados obtidos em termos de um processo de absorção de dois fótons, seguido de um processo de transferência de energia entre pares de íons de Pr<sup>3+</sup>. O processo proposto pode ser resumido da seguinte maneira: 2hν + <sup>3</sup>H<sub>4</sub> + <sup>3</sup>H<sub>4</sub> → <sup>1</sup>D<sub>2</sub> + <sup>1</sup>G<sub>4</sub> → <sup>1</sup>D<sub>2</sub> + <sup>3</sup>F<sub>2</sub> + fônons → <sup>3</sup>H<sub>4</sub> + <sup>3</sup>P<sub>0</sub> + fônons.

## POLARIZAÇÃO DE FIBRAS ÓPTICAS, TÉCNICA DE PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO

F.C.Garcia<sup>1</sup>, E.N.Hering<sup>1</sup>, L.C.G.Valente<sup>1</sup>, W.Margulis<sup>1</sup>, F.Laurell,<sup>2</sup> K. Kleveby<sup>2</sup>, B.Lesche<sup>3</sup>,  
I.C.S.Carvalho<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro-RJ; <sup>2</sup>Fysik II, Royal Institute of Technology, Stockholm, S10044; <sup>3</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro-RJ; <sup>4</sup>Instituto de Física, Universidade Estadual do Rio de Janeiro-RJ

**Palavras-Chave:** polarização, vidros, óptica não linear, fibras ópticas

É possível obter campos elétricos permanentes em vidros (polarização) através da aplicação de campos elétricos intensos a temperaturas de aproximadamente 300 °C e posterior resfriamento na presença do campo externo. Recentemente a observação de não linearidades em vidros nestas condições, com χ<sup>2</sup> comparável ao observado em cristais de LiNbO<sub>3</sub>, vem atraindo atenção especial na busca do controle destes efeitos e as possibilidades de aplicação em dispositivos. Por permitirem longos comprimentos de interação com baixas perdas, as fibras ópticas são um meio ideal para observação de efeito não lineares em vidros, mesmo em condições normais. A possibilidade de se obterem fibras com propriedades não lineares reforçadas é, por tanto, de grande interesse. Já foi reportado na literatura a criação de χ<sup>1</sup> em fibras até duas ordens de grandeza superior ao obtido por técnicas puramente ópticas. Neste trabalho apresentamos as técnicas envolvidas na polarização de fibras, incluindo a preparação das amostras e métodos de caracterização. A principal dificuldade ao se tentar polarizar uma fibra óptica é a pequena penetração do efeito, tipicamente tem sido observado profundidades inferiores a 10 μm. Isto obriga que se preparem amostras de forma a garantir que a região de guiamento esteja muito próximo da superfície. As três possibilidades analisadas são o uso de fibras D e o uso de fibras convencionais submetidas a polimento mecânico ou ataque químico. Para prevenir a ruptura da fibra com a aplicação de grandes campos elétricos, utiliza-se um vidro com aproximadamente 1 mm de espessura em série com a fibra, com o arranjo imerso em óleo. O anodo, com o qual a fibra fica em contato, é confeccionado a partir de lâmina de silício para garantir uma boa planicidade. Durante a preparação é possível monitorar continuamente o efeito induzido através da birrefringência causada pelo próprio campo de polarização.

## **ENLACE DE RECIRCULAÇÃO PARA SISTEMAS DE COMUNICAÇÕES ÓPTICAS DE ALTAS TAXAS E LONGAS DISTÂNCIAS**

*H.L.Fraguito e C.Mazzali*

Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp - SP

*Palavras-Chave:* fibras ópticas, comunicações ópticas, solitons

Apresentamos a implementação experimental de um enlace de recirculação de fibras ópticas voltado para o estudo do desempenho de dispositivos e sistemas de comunicações ópticas em altas taxas e longas distâncias.

Nos últimos anos o campo de pesquisas em comunicações ópticas vêm sofrendo uma sensível mudança, onde a caracterização individual de dispositivos perdeu espaço se comparada com a análise de sistemas e configurações como um todo. Técnicas de compensação de dispersão, propagação solitônica, sistemas WDM, etc. possibilitam uma considerável sobrevida dos sistemas instalados e permitem uma sensível elevação da capacidade dos novos sistemas sem a necessidade de uma equivalente melhora nos dispositivos.

O enlace aqui apresentado é formado basicamente por duas seções de 25 km de fibras DS (Dispersion Shifted), e uma seção de fibra convencional, sendo que a utilização de cada uma destas seções pode ser controlada em tempo real durante a propagação do sinal sob análise, através de um acoplador direcional eletro-óptico em configuração Y. Este esquema permite uma grande flexibilidade do enlace, e a inclusão de dispositivos auxiliares como controladores de polarização, filtros, amplificadores ópticos, moduladores, acopladores e até absorvedores saturáveis, permitem a utilização do enlace como uma eficiente bancada de simulações de sistemas, possibilitando por exemplo, o estudo dos efeitos gerados pela ASE (amplified spontaneous emission) e pela saturação do ganho dos amplificadores ópticos.

Apresentamos como primeiros resultados obtidos com o enlace, a propagação linear por mais de 400 km com amplificação óptica do sinal a cada 25 km, e uma configuração onde encontram-se acoplados o enlace e um laser em anel de fibra dopada com érbio, cuja operação conjunta desempenha o papel de uma memória óptica com capacidade superior a 600 kbits.

(CAPES, CNPq, CPqD Telebrás, FAPESP, FINEP, PADCT)

## **AVALIAÇÃO DA TÉCNICA DE DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURAS SECUNDÁRIAS DE PROTEÍNAS POR MÉTODOS DE AUMENTO DE RESOLUÇÃO.**

*Rubens Bernardes Filho<sup>1,2</sup>, Lucimara A. Forato<sup>1,2</sup>, José Dalton da C. Pessôa<sup>1</sup>, Luiz A. Colnago<sup>1,2</sup>*

1. EMBRAPA/CNPDIA, C. P. 741; 13560-970, São Carlos, SP.

2. IQSC-USP, Instituto de Química de São Carlos, SP.

**Palavras-Chave:** estrutura de proteínas, aumento de resolução, espectroscopia infra-vermelho

Apesar de bem conhecida a sensibilidade das bandas de infra-vermelho (IV) às estruturas secundárias de proteínas (ESP) sua quantificação a partir do espectro não é trivial e apresenta vários problemas práticos e conceituais. Um desses problemas é a grande sobreposição dos sinais de IV na banda de amida I entre 1600 e 1700  $\text{cm}^{-1}$  que é a mais usada nestes estudos.

Uma solução encontrada foi usar técnicas para aumentar a resolução do sinal e conseqüentemente aumentar a separação entre as linhas. Para este fim têm sido usadas: derivadas, deconvolução de Fourier e fitting do sinal original ou deconvolvido. Como a validade destas técnicas na quantificação tem sido questionada por vários autores, fizemos uma avaliação de cada uma dessas técnicas. Elas foram aplicadas a espectros simulados, uma vez que os espectros reais podem estar distorcidos devido a: ruído, interferência de solventes, erros instrumentais e não se ter com precisão os valores de altura, áreas, larguras de linhas e forma dos sinais. A conclusão da avaliação dessas técnicas é que as derivadas não podem ser usadas na quantificação, como sugerida na literatura, uma vez que as intensidades e áreas são altamente dependentes da forma e largura de linha dos componentes individuais do espectro. Só devem ser usadas qualitativamente. A deconvolução de Fourier distorce menos o sinal que a derivada. No entanto a área e a intensidade também não se correlacionam com o sinal original, quando as largura de linhas são diferentes. O fitting do sinal deconvolvido usando como parâmetros de entrada o número e posição dos picos, fornecidos pela segunda derivada, apresentou resultado superior a derivada e deconvolução isoladamente. No entanto, esta técnica está sujeita a influência do operador na escolha de parâmetros empíricos que podem ocasionar "overconvolution" do sinal. O melhor resultado foi obtido através do fitting do sinal original.

(EMBRAPA)

## **ESTRUTURAS DE ABZ-PEPTÍDEOS EM INTERFACE ÁGUA-LIPÍDIO**

*Rozane Turchiello<sup>1</sup>, Maria Teresa Lamy-Freund<sup>1</sup>, Luis Juliano<sup>2</sup> e Amando Sinuti Ito<sup>1</sup>*

1. Instituto de Física da Universidade de São Paulo. 2. Escola Paulista de Medicina

**Palavras chave:** peptídeos, fluorescência, lipídios.

O ácido amino-benzóico é um cromóforo que utilizamos para monitorar propriedades estruturais de peptídeos. Em meio aquoso apresenta um máximo de absorção em 310 nm. com máximo de emissão fluorescente em 396 nm. Embora o efeito de solvente seja pequeno na absorção, a emissão fluorescente apresenta significativo deslocamento para o azul em meios apolares: observamos deslocamentos de 5, 6, 9 e 12 nm para o Abz em benzeno, tolueno, etanol e ciclohexano, respectivamente. Examinamos a fluorescência do Abz ligado ao terminal amino de peptídeos da família das bradicininas, hormônios biologicamente ativos em processos relacionados a controle de pressão e inflamações. Um conjunto de sete peptídeos dessa família apresentou espectros similares no que diz respeito à forma de linha e à posição espectral. Em cinco deles a intensidade de fluorescência foi drasticamente reduzida devido à presença da molécula de etilenodiaminodinitrofenil (EDDNP) ligada ao terminal carboxila, que age como aceitador em processo de transferência de energia, suprimindo a fluorescência do ABZ. Examinamos os peptídeos em presença de vesículas de palmitoiloleoil fosfatidilserina (POPS). Em excesso de POPS, verificamos alterações nas posições espectrais, nas intensidades e nas anisotropias dos peptídeos. Os deslocamentos espectrais variaram de 2.4 nm até 9.0 nm. As anisotropias situaram-se entre 0.081 e 0.281, sempre acima dos valores correspondentes em meio aquoso, inferiores a 0.040. Nos peptídeos sem EDDNP a intensidade da fluorescência aumentou em presença das vesículas, indicando inserção do ABZ na bicamada. Dois fragmentos com 6 aminoácidos, na maioria polares, tiveram as menores variações espectrais. Finalmente, os tres peptídeos maiores apresentaram diminuição na intensidade de fluorescência, em aparente contradição com os dados de posição espectral e anisotropia que sugerem penetração na bicamada. Essa diminuição, porém, pode ser interpretada como resultante de mudanças estruturais nesses peptídeos, tal que as distâncias entre as suas extremidades diminuiram.

(FAPESP.CNPq, FINEP)

## SURFACTANT/POLYMER COMPLEXES OF NON-IONIC SURFACTANTS AND NEUTRAL POLYMERS STUDIED BY DYNAMIC LIGHT SCATTERING

Eloi Feitosa,<sup>\*</sup> Wyn Brown<sup>#</sup> and Per Hansson<sup>#</sup>

<sup>\*</sup>Dept. of Physics, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto, SP, Brazil; <sup>#</sup>Institute of Physical Chemistry, University of Uppsala, Sweden.

Here we show result of dynamic light scattering that provide evidences of complex formation between the well known micelle-forming non-ionic surfactant pentaethyleneglycol mono n-dodecylether ( $C_{12}E_5$ ) and neutral water-soluble polymer poly(ethylene oxide) (PEO,  $MW=6 \times 10^5$ ). The behavior of the PEO/ $C_{12}E_5$  complex is described under changes in concentrations of the individual components at 20°C. One or two modes of the relaxation time distributions, obtained from the Inverse Laplace Transform (ILT) of the measured intensity correlation function, are observed depending on the concentrations of the components or temperature, suggesting the presence of PEO/ $C_{12}E_5$  complexes alone or co-existing with free micelles in solution. At low concentrations of one or both the components there are only complexes in solution (single-modal distribution); above a certain concentration of polymer or surfactant, free micelles appear owing to saturation effects, with the complex (slow) mode being dominant. It is shown that the micellar clusters are formed within the PEO coil leading to a progressive swelling of the later for steric reasons. The dimensions of the PEO/ $C_{12}E_5$  complex increase with increasing surfactant concentration to a value of  $R_H = 94\text{nm}$  at 3.5 wt% of  $C_{12}E_5$ . The  $R_H$  of pure PEO coil and  $C_{12}E_5$  micelles are, respectively, 26nm and 12nm. Fluorescence quenching measurements show that the average aggregation number of  $C_{12}E_5$  micelles increases significantly on addition of PEO. The temperature of clouding point (at which the solution clouds) is substantially lower than that for  $C_{12}E_5$  in water and is strongly dependent on the PEO concentration.

**Key words:** Neutral polymer, non-ionic surfactant, polymer/surfactant complex.

**Acknowledgment:** CNPq, NUTEK, TFR.

## Equação de "Linkage" entre a ligação diferencial de prótons e água no enovelamento de citocromo-c induzido por sorbitol

Alexandre Cesar Dourado Neves, João Ruggiero Neto, Marcio Francisco Colombo

Departamento de Física, Laboratório de Biofísica Molecular, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas UNESP-Câmpus de São José do Rio Preto-SP

E-mail: macgive@ibilce.unesp.br

**Palavras:** citocromo-c, estado intermediário, SVD.

Dados espectroscópicos de absorção óptica na região do visível do processo desnaturação do citocromo-c induzido por pH, em água e em concentrações variadas de sorbitol são apresentados e analisados com a técnica computacional de decomposição de valor singular (SVD) e ajuste não-linear de modelo de desnaturação envolvendo um estado intermediário. Os parâmetros relevantes para a descrição do processo de desnaturação,  $K_1$ ,  $n_1$ ,  $K_2$  e  $n_2$ , isto é, as constantes de equilíbrio entre os estados e o número de prótons ligados que induzem as transições são determinados. Estes parâmetros permitiram a construção das curvas de distribuição das espécies conformacionais nativa (N), intermediária (I) e desnaturada (D) em função do pH e da concentração de sorbitol. Ademais, foi possível correlacionar os valores de  $\text{pH}_{50\%}$  para a transição  $N \Rightarrow I$  e o  $\text{pH}_{50\%}$  para a transição  $I \Rightarrow D$ , sendo estes os valores de pH onde metade da transição entre os estados  $N \Rightarrow I$  e  $I \Rightarrow D$  ocorrem, respectivamente, com o potencial químico da água. A dependência é linear encontrada entre estas variáveis, e é analisada em termos de uma equação de "linkage" entre a ligação diferencial de prótons e moléculas de água à proteína. Desta relação foram determinadas que a cada próton ligado ao citocromo-c no processo de desenovelamento, cerca de 30 moléculas de água ligam-se à proteína. Dado que da análise da dependência das constantes de equilíbrio de desnaturação do estado N e D envolve cerca de 6 prótons, deduz-se que cerca de 180 moléculas de água ligam-se ao estado desnaturado em relação ao estado nativo.

**Apoio Financeiro:** Fapesp, CNPq

## APLICAÇÃO DA CÉLULA FOTOACÚSTICA ABERTA (OPC) NA OBTENÇÃO DE CURVAS DE ATIVIDADE FOTOSSINTÉTICA

*Antonio Carlos Pereira*

Departamento de Física-Centro Tecnológico-UFMA

*Paulo Roxo Barja, Antonio Manoel Mansanares e Edson Corrêa da Silva*

Instituto de Física Gleb Wataghin- UNICAMP

*Palavras-Chave:* fotoacústica, atividade fotossintética, vegetais

Nos últimos anos a OPC tem sido bastante utilizada em estudos de fotossíntese *in vivo* e *in situ*, por ser uma técnica sensível e não invasiva. Esta técnica permite o acompanhamento de processos fisiológicos de vegetais em diversas etapas de crescimento. Neste trabalho monitoramos a atividade fotossintética de três espécies de eucalipto (*urophylla*, *grandis* e *urograndis*) e do feijoeiro. O sinal fotoacústico obtido de folhas vegetais, após absorção de luz modulada, é a soma vetorial de duas contribuições principais: fotobárica e fototérmica. A contribuição fotobárica é devida a liberação de oxigênio resultante das reações fotoquímicas; a fototérmica é produzida por processos de desexcitação não radiativa das moléculas. Ambas as contribuições geram ondas de pressão detectadas por um microfone. Transientes são obtidos para diferentes intensidades de luz de excitação, através dos efeitos positivo e negativo. O efeito positivo é observado em frequências de modulação acima de 200Hz, quando se aciona luz branca contínua de alta intensidade (em torno de  $250\text{W/m}^2$ ) para saturar os centros de reação da fotossíntese. O efeito negativo, obtido em baixas frequências de modulação (usualmente 17Hz) quando se incide luz adicional saturante, separa a contribuição fotobárica da fototérmica. Os dados obtidos permitem construir as curvas de atividade fotossintética e do sinal térmico em função da intensidade luminosa incidente. Apresentamos dados obtidos em três espécies de eucalipto e plantas de feijão. Utilizamos cinco plantas de cada espécie de eucalipto, nas quais efetuamos medições de efeitos positivo e negativo, submetendo-as a intensidades luminosas entre 6 e  $19\text{W/m}^2$ . Os dados da atividade fotossintética do eucalipto sugerem uma discriminação entre as espécies estudadas. A curva de atividade fotossintética obtida com amostras de feijão, em intensidades de luz modulada entre 6 e  $64\text{W/m}^2$ , mostra que o processo de saturação fotossintética desta espécie evidencia-se a partir de  $45\text{W/m}^2$ .

## ESTUDOS CONFORMACIONAIS DO DOMÍNIO-ÂNCORA DA PROTEÍNA NEF DE HIV-1 POR NMR BIDIMENSIONAL DE ALTA RESOLUÇÃO

*C.E. Munte, M. Geyer, J. Schorr, R. Kellner\*, H.R. Kalbitzer*

Max-Planck Institut für Medizinische Forschung - Heidelberg - Germany

\*Universität Mainz - Mainz - Germany

*Palavras-Chave:* HIV-1 nef, NMR, determinação estrutural

Nef é uma proteína regulatória do vírus da imunodeficiência humana (HIV), essencial à sobrevivência do vírus *in vivo* porém não *in vitro*. Por essa razão Nef representa um possível alvo terapêutico: pode ser o responsável pelo escape do vírus ao sistema imunológico. Clivagem *in vivo* da proteína por protease viral leva a dois fragmentos: o domínio-âncora (2-56) e o bem enovelado domínio-central (57-206). Estudos por NMR multidimensional de alta resolução foram realizados no domínio-âncora, objetivando a determinação da estrutura tridimensional do peptídeo, em solução e pH fisiológicos. Foram identificados os sistemas de spins correspondentes aos aminoácidos na sequência e seus respectivos deslocamentos químicos. Quantificação dos NOEs e constantes de acoplamento J foi utilizada para obtenção de distâncias interprotônicas e ângulos torcionais  $\phi$ , usados como restrições em programas de dinâmica molecular (X-PLOR3.1). Os resultados levam a concluir que o domínio-âncora consiste de um peptídeo praticamente sem estrutura terciária, o que é coerente com a hipótese de que esse domínio tenha como função a fixação da proteína à membrana. Comparações com espectros da proteína Nef completa garantem a identidade entre as conformações do domínio-âncora antes e após a clivagem.

## DISTANCE DEPENDENCE OF PHOTOINDUCED ELECTRON TRANSFER IN METALLOPORPHYRIN DIMERS

C.F. Portela<sup>\*,†</sup>, J. Brunckova<sup>†</sup>, J.L. Richards<sup>†</sup>, B. Schöllhorn<sup>†</sup>  
Y. Yamamoto<sup>°</sup>, D. Magde<sup>†</sup>, T.G. Traylor<sup>†</sup>, and C.L. Perrin<sup>†</sup>

<sup>†</sup>University of California at San Diego, Department of Chemistry and Biochemistry,  
9500 Gilman Drive, La Jolla, CA 92093-0506, <sup>\*</sup>Universidade Federal de Pernambuco,  
Recife, Brazil, <sup>°</sup>Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, Brazil

*Key Words:* electron transfer, porphyrin, fluorescence

In order to study the dynamics and mechanism of intramolecular photoinduced electron transfer (PET) reactions, a series of (Zn<sup>II</sup>-Fe<sup>III</sup>) *meso*-tetraarylmetalloporphyrin dimers were synthesized and the kinetics of their PET reactivity were measured. Molecular building blocks were prepared by selective aromatic nucleophilic substitution of the fluorine atom of tetraarylporphyrins containing a single *meso*-pentafluorophenyl group. This synthetic approach enables to make various systematic modifications such as type and length of spacer, metal center, and redox potential difference between donor and acceptor. Symmetric dimers, made of two identical porphyrin rings covalently linked with a rigid bridge, carry a zinc(II) and an iron(III) as central metals. By using different rigid bridges such as piperazine, bipiperidine, and piperazine-C<sub>6</sub>F<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>F<sub>4</sub>-piperazine, the edge-to-edge distance between porphyrins varied from 14.4, 18.6 to 27.3 Å respectively. The PET rate constants from the lowest excited singlet state of the zinc porphyrin to the iron porphyrin(*bis*-imidazole) were measured in dichloromethane. Fluorescence quenching showed that the electron transfer rate decreased by a factor of 165 when the distance increased by 13 Å. This slow exponential decay is indicative of a very weak attenuation of the electronic coupling with distance.

(FACEPE, NSF)

## SISTEMA COMPACTO PARA MONITORAMENTO "IN VIVO" E "IN SITU" DA FOTOSÍNTESE ( CONSUMO DE CO<sub>2</sub> E EVOLUÇÃO DE O<sub>2</sub> )

Marcos D. Silva, Luiz Carlos M. Miranda e Luciano G. Oliveira

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS

12201-970 São José dos Campos, SP, marcos@las.inpe.br

*Palavras-chave:* Fotossíntese, Fotorrespiração, Fotoacústica

O monitoramento da fotossíntese, baseado nas medidas de consumo de CO<sub>2</sub> e evolução de O<sub>2</sub>, é de fundamental importância para os fisiologistas e geneticistas de vegetais. É a partir do estudo da atividade fotossintética em resposta à absorção de nutrientes e poluentes, intensidade luminosa e condições do ar e temperatura, que novas variedades, fertilizantes e pesticidas são avaliados. Neste trabalho apresentamos um sistema compacto para medidas simultâneas, "in vivo" e "in situ" da evolução de O<sub>2</sub> e consumo de CO<sub>2</sub> durante a fotossíntese. O Analisador de CO<sub>2</sub> se baseia na absorção do Infra-vermelho (4,26 µm). A câmara ativa, onde circula a mistura Ar + CO<sub>2</sub> a ser consumida pelo vegetal durante a fotossíntese, tem um orifício em sua parte superior, o qual é selado pela folha vegetal em estudo. A radiação infra-vermelha, que atravessa a câmara de gás, é detectada por sensores de radiação após passar por filtros de interferência no comprimento de onda de absorção do CO<sub>2</sub> (4,26 µm). Dessa maneira, durante a fotossíntese, a quantidade de CO<sub>2</sub> consumida da câmara ativa é medida pela variação na absorção da radiação infra-vermelha. O monitor de O<sub>2</sub> consiste de uma célula fotoacústica aberta acoplada sobre a folha do vegetal em estudo. A iluminação DC, no pico de absorção da clorofila (690 nm) para a indução da fotossíntese, é transmitida através de um cabo óptico, que possui um segundo ramo, para iluminação AC, responsável pela geração do sinal fotoacústico. A produção de O<sub>2</sub> durante a fotossíntese aumenta a pressão estática no interior da câmara fotoacústica, variando a sua resposta proporcionalmente à quantidade de O<sub>2</sub> gerada.

FAPESP, PIBIC-CNPq

## DESENVOLVIMENTO DE UM TOMÓGRAFO DE RMN DE 0,5 TESLA

*Henrique Jota de Paula Freire, Rodrigo Villares Portugal,  
Edson Luiz Gea Vidoto, Mateus José Martins e Horácio Carlos Panepucci*  
Departamento de Física e Informática - Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* imagem por ressonância magnética, instrumentação, informática médica

Este projeto consiste no desenvolvimento, construção, instalação e operação hospitalar de um tomógrafo de 0.5 Tesla que é uma evolução de um sistema de baixo campo (0,05 Tesla) já em funcionamento. A instalação deste novo tomógrafo em um hospital é uma etapa fundamental para o aprimoramento do projeto devido a participação do usuário final. A evolução para o sistema de 0,5 Tesla envolve modificações de *hardware* devido à nova frequência (21 MHz), e de *software* devido à nova plataforma computacional (IBM/PC-Windows). Os transdutores e o *hardware* de controle foram especificados e projetados para realizarem detecção em fase-quadratura, significando uma melhora teórica de 40% na relação sinal-ruído comparado com o sistema de detecção linear. Simulações computacionais destes elementos são realizadas para obterem-se os parâmetros ótimos de construção dos mesmos. Os programas de aquisição e processamento de dados foram implementados num módulo VBX para o Visual Basic, que testado no sistema atual mostrou uma diminuição de 32 para 4 segundos do tempo de processamento dos dados até a visualização das imagens. Os programas de controle do espectrômetro estão sendo adaptados para a nova plataforma operacional. A interface gráfica com o usuário, que objetiva proporcionar um ambiente de fácil operação do tomógrafo, é implementado a partir de um protótipo especificado no modelo SADT e testado com usuários finais. Este utiliza o VBX de aquisição e processamento dos dados e coordena as chamadas aos programas de controle do espectrômetro. O sistema de banco de dados para armazenamento e gerenciamento dos resultados do tomógrafo segue o modelo relacional e foi especificado no modelo ER estendido. Além do banco de dados, são desenvolvidos os aplicativos, formulários de consulta e relatórios do sistema de gerenciamento de banco de dados. Os diversos módulos de *software* são implementados em C++, Visual Basic e Access. Como resultado deste projeto, espera-se um aumento da relação sinal-ruído, redução no tempo de processamento, melhoria da resolução, menor custo e maior facilidade de operação, consulta aos resultados e manutenção.

(FINEP, CNPq)

## PROPRIEDADES DOSIMÉTRICAS DE HIDROXIAPATITAS SINTÉTICAS COM COMPOSIÇÃO SIMILAR A DOS TECIDOS CALCIFICADOS

*Liana M. Oliveira \*, Maria de Fátima T. Gomes\*\*\*, Vera Salim\*\*, Neuman S. Resende\*\*,  
Ricardo Lopes\*, Alexandre Malta Rossi\*\*\**

\* Programa de Engenharia Nuclear, COPPE/UFRJ

\*\* Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ

\*\*\* Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

*Palavras-Chave:* dosimetria, hidroxiapatita, RPE

Radicais  $\text{CO}_3^{2-}$  existentes como impurezas (2-4%) na fase mineral de ossos e dentes (hidroxiapatita, HAp) são decompostos pelas radiações ionizantes em radicais  $\text{O}^-$  e  $\text{CO}_2^-$ . Estes grupos possuem grande estabilidade à temperatura ambiente, sendo por isto, propostos como indicadores de doses em acidentes radiológicos e na datação geológica. A determinação da dose acumulada em amostras naturais é, entretanto, dificultada pelas variações da concentração de  $\text{CO}_3^{2-}$  e pela complexidade do espectro de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE).

Neste trabalho sintetizou-se hidroxiapatitas ( $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ) dopadas com íons carbonatos em diferentes concentrações, e caracterizou-se o material sintetizado com técnicas tais como a Difração de Raios-X, Espectroscopia do Infravermelho, TPD e análise química elementar. O material sintetizado foi irradiado em uma fonte de  $\text{Co}^{60}$  (taxa de dose de 0.1093 Gy/min) e estudado por RPE. O espectro de RPE das amostras irradiadas indica a formação de espécies  $\text{CO}_2^-$  com simetria axial ( $g = 2.0025$  e  $g = 1.9975$ ) e ortorrômbica ( $g = 2.0032$ ,  $g = 2.0018$  e  $g = 1.9975$ ), situadas em sítios de OH e/ou  $\text{PO}_4^{3-}$  da HAp e com estabilidade comparável a dos radicais  $\text{CO}_2^-$  criados pela radiação na HAp biológica. Irradiações com doses aditivas indicam que os sinais de RPE destas espécies não saturam no intervalo 1 - 4k Gy, podendo ser detectados em amostras irradiadas com doses inferiores a 1 Gy. Os resultados obtidos sugerem que hidroxiapatitas sintéticas apresentam propriedades dosimétricas similares as dos tecidos calcificados, podendo ser um material alternativo para a dosimetria pessoal.

(CNPq)

## ELECTRON SPIN RESONANCE SPECTROSCOPY OF MAJOR INTRINSIC PROTEINS OF LENS RECONSTITUTED IN LIPID VESICLES

*Gilza M.P. Prazeres,*  
Instituto de Biofísica-UFRJ and Departamento de Química-UFMA  
*Marília P. Linhares,*  
Instituto de Física-UFRJ  
and *Paulo M. Bisch*  
Instituto de Biofísica-UFRJ

*Palavras-Chaves::* ESR, reconstituted vesicle, lens proteins

Major intrinsic protein (MIP) is a 26-kDa protein expressed exclusively in the plasma membranes of vertebrate lens fiber cells where it comprises over 60% of the membrane protein. Hydrophobicity plots predicted that MIP is an integral membrane protein with cytoplasmic amino and carboxyl termini and six bilayer-spanning domains. At least one of the membrane-spanning domain is amphipathic and can form a hydrophilic pore. MIP reconstituted into liposomes exhibits voltage-dependent channels permeable to ions and small molecules. In planar lipid bilayers, MIP forms single channels of various conductances (up to 3 nanosiemens) and a weak selectivity for anions. We are investigating MIP channels of chicken lens incorporated into phospholipid vesicles using Electron Spin Resonance (ESR). The methodology used is the following: 1- isolation and purification of MIP, 2- reconstitution of purified MIP into phospholipid vesicles, 3- ESR spectroscopy of vesicles using nitroxides spin labels. We used fatty acid nitroxide spin probes (doxyl-stearic acid) incorporated in vesicle to monitor the lipid portion, and nitroxide-containing maleimide derivative for the protein. The method gives information about structural changes in lipid bilayer and the formation of lipid domains around the channel. The conformation changes related with MIP biological activity is investigated using both changes on the lipid bilayer or directly.

## PREFERENTIAL BINDING OF TERTIARY AMINE AMPHIPATHIC DRUGS TO NEGATIVELY CHARGED MEMBRANE LIPIDS

*Sônia R. W. Louro, Celia B. Anteneodo, Eliane Wajnberg*  
Departamento de Física – PUC-RIO, Instituto de Biofísica – UFRJ,  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF, RJ

*Key-words:* spin labels, biomembranes, chlorpromazine

A wide class of drugs possesses an amphipathic character, with aromatic rings in the hydrophobic region, and a tertiary amine in the polar head-group. Both polarity and electrostatic potential influence the ionization state of their molecules (positively charged or neutral). The acidic polar head-group of spin labeled stearic acids (SASL) also presents ionization equilibrium. The ESR spectra of SASLs in membrane bilayers are sensitive to their ionization state (neutral or negatively charged). In this work they are used to obtain information on the extent of influence of negatively charged lipids on the interaction of tertiary amine drugs with membranes. Chlorpromazine and dibucaine in their positively charged form, with membrane binding constants differing by a factor of 8, were used to titrate stearic acid spin labeled egg lecithin liposomes. The ESR spectra were analyzed to obtain drug induced changes in the dynamics and in the ionization state of the stearic acid. The concentrations of membrane bound drugs were obtained spectrophotometrically. The results show that the determinant factor of stearic acid ionization state is the drug concentration in the membrane, and not in aqueous solution. A value of the order of  $10^2 \text{ M}^{-1}$  is estimated for drug/stearic acid binding constant in the membrane. This indicates that the affinities of drug molecules for the negatively charged lipids are two orders of magnitude greater than those for uncharged lipids. Electrostatic surface membrane potentials at stearic acid sites are calculated using the drug induced shift of the ionization constant. Surface charge densities at stearic acid sites are estimated using the Poisson-Boltzmann approximation for the potentials. They are ten times higher than those experimentally obtained, under the assumption of uniform surface distribution of drug molecules. This also reveals the preferential distribution of drug molecules around stearic acid sites.

(FINEP, MCT, CNPq)

## STRUCTURAL PROPERTIES OF CHARGED LIPID DISPERSIONS

Karin A. Riske<sup>1</sup>, Shirley Schreier<sup>2</sup>, Mario J. Politi<sup>2</sup> and M. Teresa Lamy-Freund<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física and <sup>2</sup>Instituto de Química, USP-SP

**Key Words:** DMPG, ESR, light scattering

The thermotropic behavior of negatively charged dimyristoylphosphatidylglycerol (DMPG) dispersions in aqueous medium was studied by light scattering and electron spin resonance (ESR) of spin labels incorporated in the lipid phase. The gel-liquid crystalline transition temperature could be well monitored by ninety degree light scattering measurements at 280 nm. A sharp decrease in light scattering indicates the temperature of phase transition. This optical effect can be attributed to changes in the refractive index of the suspensions due to a decrease on the bilayer density. The main transition temperature was found to be highly dependent on the DMPG concentration and the sample ionic strength. However, a second temperature transition was monitored by light scattering for DMPG dispersions at low ionic strength. For temperatures above that second transition temperature the sample turned as turbid as it was at the gel state. This effect was only partially explained by refractive index variations. That second transition was much broader than the main lipid phase transition, and not completely reversible. Phospholipids and cholesterol spin label derivatives, incorporated in the lipid phase, could only monitor the main structural transition, suggesting that the second temperature transition, observed by light scattering, could be attributed to an increase in the size and/or molecular weight of the DMPG vesicles and not to a bilayer structural change. This was confirmed by the Zimm plot analysis of the light scattered at different angles.

(FAPESP, CNPq and FINEP)

## ESTUDO DA DEPENDÊNCIA DE $K_{sp}(0)$ CHONDROITIN-SULFATO/ $Ca^{+2}$ E O GRAU DE IONIZAÇÃO EM DIFERENTES FORÇAS IÔNICAS

Cecília C. M. dos Santos<sup>1,2</sup>, Marcelo A. Fossey<sup>1</sup>, João Ruggiero Neto<sup>1</sup>

1- Departamento de Física, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto, SP

2- Instituto Adolfo Lutz, Laboratório I, São José do Rio Preto, SP

A ligação do íon  $Ca^{+2}$  ao polissacarídeo chondroitin-sulfato A (um copolímero alternado ácido  $\beta$ -glucurônico-[1 $\rightarrow$ 3]-N-acetil- $\beta$ -galactosamina-4-sulfato-[1 $\rightarrow$ 4], CHS) é investigada com diferentes forças iônicas. São analisados dois graus de ionização ( $\alpha_1$ ) diferentes do poliácido:  $\alpha_1=1.0$  e  $\alpha_1=0.56$ . A interação do cálcio com o polieletrólito é medida utilizando o indicador metalocrômico tetrametilmurexida (TMM) e o método espectrofotométrico utilizado é o de dois comprimentos de onda (método da razão), sendo as medidas realizadas a temperatura de 25°C. Os resultados, apresentados na forma de isotermas de Scatchard, indicam uma forte dependência entre a constante de associação aparente  $K_{sp}(0)$  do cálcio ao CHS com a força iônica, tanto na forma parcialmente ionizada ( $\alpha_1=0.6$ ) quanto na forma totalmente ionizada do poliácido ( $\alpha_1=1.0$ ), indicando que a interação é principalmente de origem eletrostática em ambos os casos. É também analisado o número de sítios de ligação ( $n$ ) ocupados pelo ligante ( $Ca^{+2}$ ), verificando-se que  $n$  cresce com o aumento da força iônica para  $\alpha_1=1.0$ , e se mantém praticamente constante para  $\alpha_1=0.6$ . Os dados experimentais são analisados usando os modelos teóricos de condensação de contraíons ou modelo de Manning de duas variáveis (CC) e o modelo de cela, que envolve a solução de equação de Poisson-Boltzmann (EPB).

**Palavras-chave:** polieletrólitos, polissacarídeos, chondroitin-sulfato  
**Apoio Financeiro:** Fapesp, CNPq e Fundunesp

## DISTRIBUIÇÃO ESTATÍSTICA E TAXAS DE COLISÃO DE MOLÉCULAS ADITIVAS EM LÍQUIDOS COMPARTIMENTADOS (MICELAS DE SDS).

Antonio José da Costa Filho<sup>1</sup>, Otaciro Rangel Nascimento<sup>1</sup> e Barney L. Bales<sup>2</sup>

1-Departamento de Física e Informática, IFSC, USP.

2- Department of Physics and Astronomy, California State University at Northridge.

*Palavras-Chave:* Marcador de spin, micelas de SDS, taxas de colisão.

**Introdução:** Um aspecto importante de líquidos compartimentados é sua habilidade em concentrar moléculas aditivas em volumes efetivamente pequenos, o que aumenta a taxa em que essas moléculas encontram uma às outras. Em princípio, a taxa de colisão entre duas moléculas aditivas pode ser monitorada através da medida de alguma quantidade que se altere durante a colisão. Na prática, como as colisões são muito frequentes, uma técnica rápida de medida é necessária, e apenas duas têm sido desenvolvidas: "quenching" da fluorescência e relaxação de radicais livres estáveis estudada por RPE.

**Materiais e Métodos:** O modelo físico empregado neste problema utiliza uma solução diluída de radical nitróxido hidrofóbico (indicador), na presença e ausência de uma concentração variável de moléculas paramagnéticas (alargadores). Neste caso utiliza-se  $\text{Cu}^{++}$ . Medidas anteriores de RPE em banda X (9GHz) desse tipo de sistema foram feitas por Bales *et al*<sup>1</sup>. Neste trabalho são apresentadas as medidas de RPE realizadas em banda L (1,3GHz) do sistema de micelas na presença do radical nitróxido e  $\text{CuSO}_4$ .

**Resultados e Conclusão:** As medidas em banda L possibilitam a determinação do parâmetro hiperfino  $A_0$  com mais precisão, já que o efeito do alargamento da linha pelo "g-shift" fica minimizado para esta frequência de microonda. Os resultados experimentais concordam com a teoria apenas quando assume-se a existência de repulsão eletrostática entre íons  $\text{Cu}^{++}$  posicionados na mesma micela. Esta energia de repulsão e a frequência de troca entre o radical nitróxido e o  $\text{Cu}^{++}$  são determinadas e comparadas com os da ref. [1], corroborando e evidenciando as suas conclusões.

[1] Bales, B.L.; Stenland, C. *J. Phys. Chem.*, 1995, 99, 15163.

(FAPESP, CNPq)

## DNA AND PLPC CONCENTRATED SOLUTIONS: A SAXS STUDY OF INTERACTING SYSTEMS

V. Castelletto, R. Itri and L.Q. Amaral, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

**Keywords:** Concentrated Solutions - DNA-PLPC-SAXS

Results obtained by small angle X-Ray scattering (SAXS) in systems with interactions are presented, with emphasis on information obtained from both the particle form factor  $P(q)$  and interference function  $S(q)$ . DNA solutions are studied<sup>1</sup> in the isotropic (I) phase in the semidilute regime until the I-cholesteric phase transition. The interference peak position  $q_m$  as a function of concentration fits an universal curve with exponent 1/2 for an effective rod length  $L=340\text{Å}$ . The form factor of the DNA fragments is obtained from the less concentrated solution, where interference effects are not present in the measured range, and it is in good agreement with the B form of DNA. The interference curves for the more concentrated solutions are experimentally derived by dividing the corrected SAXS curve by the particle form factor. The Indirect Transformation Method in Reciprocal Space is used to get the desmeared SAXS curve. Modeling of the interference peaks with Gaussian functions compares well with recent theories for interparticle interactions on solutions of rodlike polyelectrolytes. The peak broadening  $\beta$  expressed as  $\beta L$  in function of concentration also fits universal curve with exponent 1/2. The fitting shows that the short-range order for rods in the semidilute region has a correlation length slightly above first neighbors. In the case of inhomogeneous globular micelles as PLPC (palmitoyl lisophosphatidil choline) it is also possible to obtain<sup>2</sup> the particle distance distribution function  $p(r)$  for lower concentrations. For higher concentrations the SAXS curve is fitted to the smeared product  $P(q)S(q)$ , with  $S(q)$  calculated in the mean spherical approximation. The lipid system PLPC/water is an example of isotropic solution leading to a cubic phase. Analysis of SAXS in terms of  $P(q)$  and  $S(q)$  show that the micelle form remains stable and with small anisotropy. This is in contrast with detergent/water systems, where there is micellar growth and the isotropic solution leads to an hexagonal phase.<sup>3</sup>

1-V.Castelletto, R.Itri and L.Q.Amaral, *Macromolecules* 28, 8395 (1995). 2- R. Itri and L.Q. Amaral, *J. Applied Cryst.* 27, 20 (1994). 3- R. Itri and L.Q. Amaral, *Phys. Rev.* E47, 2551 (1993).

## ESTUDO COMPARATIVO DA INFLUÊNCIA DO DECANOL E DA TETRACAÍNA EM MICELAS DE SLS

*Cilaine Verônica Teixeira, Rosângela Itri e Lia Queiroz do Amaral*

Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

**Palavras-chave:** lauril sulfato de sódio, tetracaína, espalhamento de raios-X

Sistemas micelares formados por lauril sulfato de sódio (SLS)/água/decanol vêm sendo estudados e suas transições de fases comparadas com previsões teóricas, porém estas lidam apenas com sistemas binários, não sendo capazes de prever o comportamento induzido por um terceiro componente. Já foi visto que a introdução de decanol ao sistema SLS/água induz o crescimento micelar e ao mesmo tempo pode estar sendo responsável por uma mudança na flexibilidade das micelas. Estudos comparativos estão sendo feitos com o intuito de comparar os efeitos causados pela adição do decanol com a ação obtida pela introdução de um outro componente ao mesmo sistema, no caso a tetracaína (TTC). Os nossos estudos estão sendo feitos através da técnica de espalhamento de raios-X a baixos ângulos, complementada pela técnica fotográfica de Laue, a qual indica que, às concentrações estudadas (10% SLS/água - fração molar TTC/SLS= 0,01-0,20) as amostras estão na fase isotrópica. As curvas de espalhamento foram analisadas através da modelagem do produto do fator de forma micelar pela função de interferência. A estas concentrações, o pico da função de interferência coincide com o zero do fator de forma, de modo que a curva da intensidade espalhada exibe apenas esta última função. A partir das curvas obtidas vemos que a introdução da tetracaína está alterando a forma das micelas de SLS, o que pode ser verificado pelo alargamento do pico, o qual representa o fator de forma micelar. Esse alargamento pode ser também verificado nas fotografias obtidas pelo método de Laue, onde se observa um pico definido para a fase com fração molar TTC/SLS= 0,01 e um pico largo e quase difuso para concentração maior de TTC (fração molar TTC/SLS= 0,20).

### MOLECULAR REPLACEMENT AT ITS LIMITS?

#### THE STRUCTURE DETERMINATION OF *T. cruzi* g-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE, 12 MONOMERS IN THE ASYMMETRIC UNIT AND 41% DATA COMPLETENESS AT 3.5 Å RESOLUTION

<sup>1</sup>*Beatriz G. Guimarães*, <sup>1,2</sup>*Dulce H. F. Souza*, <sup>1</sup>*Wanda D. P. Jesus* and <sup>1</sup>*Glaucius Oliva*

1. Instituto de Física de São Carlos, USP, Cx.P.369, 13560-970, São Carlos, SP;

2. Instituto de Química de São Carlos, USP.

**keywords:** *T. cruzi* g-GAPDH, x-ray diffraction, AMoRe

Recent developments in the software tools available for the Molecular Replacement Technique (AMoRe, Navaza, 1994, *Acta Cryst. A50*, 157-163) have dramatically improved the efficiency and speed of the calculations, making possible to explore a very large number of potential solutions, even in the limits of partial search models and incompleteness of diffraction data. In the search for crystallization conditions of the trypanosomal enzyme gGAPDH, a crystal form was obtained belonging to space group I4, with very large cell parameters  $a=b=307.93$  Å,  $c=119.82$  Å and diffracting to low resolution (3.5 Å). The crystal has 12 monomers per a.u.,  $V_m= 3.035$  Å<sup>3</sup>.dalton<sup>-1</sup> and 59.5% solvent. High sensitivity to radiation and lack of isomorphism between different native crystals, resulted in severe limitations in data collection. Data was measured using synchrotron radiation source at station BW6 at HASYLAB-DESY. From the seven crystals used, only two could be merged after integration. Merging of the 35139 measured reflections resulted in 29097 independent reflections (41% completeness),  $R_{merge}= 12.1\%$ . The structure was solved with program package AMoRe, using the tetramer of *T. cruzi* gGAPDH determined from another crystal form (space group P1, 2 tetramers per a.u., diffraction limit 2.8 Å) as model. 250 peaks from the rotation function had to be included to find the correct solution, highlighting the importance of assessing a large number of possible solutions. The structure was refined to 3.5 Å resolution using non crystallographic symmetry.

(OMS, PADCT/SBIO, CNPq, FAPESP and FINEP)

## Refinement of Beta Lactoglobulin Structures.

Igor Polikarpov, Sharon Brownlow<sup>†</sup> and Lindsay Sawyer<sup>†</sup>.

LNLS- C.P. 6192-CEP 13081-970-Campinas

<sup>†</sup> Biochemistry Dept., University of Edinburgh, EH8 9XD, UK

Bovine beta lactoglobulin (BLG) is a small globular protein of the lipocalin family. When exposed to pH's in the region 7 to 8, it undergoes a conformational change (termed the Tanford transition). At each side of the transition, it crystallizes in a different lattice form. Lattice Y crystals are grown in the region of the pH 7.8 and lattice X crystals grow at pH's below 6.9. The crystal structure of the BLG in a number of different crystal forms has been solved. However, refinement of the structures has proved problematic.

We used data from a crystal of spacegroup P1 with the cell parameters  $a=37.8 \text{ \AA}$   $b=49.6 \text{ \AA}$   $c=56.6 \text{ \AA}$   $\alpha=123.4^\circ$   $\beta=97.3^\circ$   $\gamma=103.7^\circ$  and one dimer per unit cell.

The structure has been re-solved with molecular replacement and refined using XPLOR to an R-factor of 19.4% (free R-factor 24.8%) against all data between 8 to 1.8  $\text{\AA}$ .

Another crystal form of the BLG (lattice Y) was successfully refined at the same time in an independent way.

This belongs to a spacegroup C222<sub>1</sub> with the cell parameters  $a=82.4 \text{ \AA}$   $b=55.4 \text{ \AA}$   $c=66.4 \text{ \AA}$  and a monomer per asymmetric unit. The model was refined with PROLSQ. The water molecules were inserted with use of ARP.

Current R-factor of the structure against all the data between 14.0  $\text{\AA}$  to 2.03  $\text{\AA}$  equals 18.3% (R-free=29.1%). At present the model contains all 161 residues except five residues at the C-terminus (residues 157-161). There are 55 waters in the structure.

Comparison of these two structures sheds some light on the nature of Tanford transition. The non-crystallographic dimer of the low pH model (lattice X) can be superimposed with the crystallographic dimer of the lattice Y by a rigid body rotation of one of the monomer of the dimer by 11°. This breaks a number of hydrogen bonds on the monomer-monomer interface and forces some of the carboxyl groups to be exposed to the solvent.

## CIRCULAR DICHROISM AND STRUCTURE PREDICTION OF 2S PLANT STORAGE PROTEIN FROM BRAZIL NUT

<sup>1</sup>Ignez Caracelli, <sup>1,2</sup>Norma Bianca S. Cretelli, and <sup>1</sup>Wanda D. P. Jesus

1. Instituto de Física de São Carlos, USP, Cx.P.369, 13560-970, São Carlos, SP;

2. Instituto de Química de São Carlos, USP.

**keywords:** albumin 2S, circular dichroism,  $\alpha$ -helical

The seed storage proteins of most dicotyledonous plants contain two major protein classes, globulins and albumins, which are distinguished on basis of solubility. These proteins are expressed during seed development as precursors which undergo co- and post-translational modification prior to deposition in protein bodies. The albumins are a more diverse group of proteins, usually soluble in water, with coefficients of approximately 2S and some are rich in cysteine. The 2S sulphur-rich proteins from the Brazil nut (*Bertholletia excelsa* H.B.K.) are members of the water-soluble albumin fraction of seed storage proteins hall-marked by their sedimentation coefficient of 2S and a variable large subunit each derived from a single polypeptide precursor by internal cleavage. The protein was purified using a procedure described by Ampe *et al.* (*Eur. J. Biochem.* **159**, 596-604, 1986), with some modifications. Circular Dichroism (CD) measurements were done with water dissolved protein, using a Jasco J700 spectropolarimeter with a 1 mm cell. The results were analyzed by the Perczel and Fassman method (Perczel *et al.*, *Protein Eng.* **4** (6), 669-679, 1991). The secondary structure prediction, based on the consensus of 8 methods and the independent prediction of reverse turns, suggests the protein to be largely  $\alpha$ -helical in nature, indicative of a bundle structure (Garatt *et al.* XX Reunião Anual SBBq, 1991). our results, showing an  $\alpha$ -helix content of about 87%, are in good agreement with the previous reported results.

(CNPq, FAPESP and FINEP)

## LIPID FLUIDITY OF ENVELOPE AND INTERCELLULAR MEMBRANES OF STRATUM CORNEUM

Antonio Alonso<sup>1</sup>, Nilce Correa Meirelles<sup>2</sup> and Marcel Tabak<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin" e <sup>2</sup>Instituto de Biologia, Universidade de Campinas e  
<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP.

*Palavras chaves:* stratum corneum, EPR, spin label

The stratum corneum (SC), the uppermost skin layer, is major barrier to body water loss and influx of external substances. This vital property of SC is almost entirely attributable to the intercellular lipids. We have extracted the lipids of intercellular membranes of SC with chloroform/methanol mixtures, which accounted for about 15% of the dry weight of SC. The spin label electron paramagnetic resonance (EPR) was used to monitor the molecular dynamics of lipids and their thermotropic behavior in vesicle preparations, intact SC and extracted residues of SC (containing covalently bound lipids - corneocyte envelope). Comparing the fluidity in these three samples it is seen that the vesicles are more fluid and the envelope membrane are less fluid than the intact SC membranes. The rotational correlation time of the probe 16-doxylstearic acid revealed a membrane phase transition at about 54°C for the three systems. For vesicles and intact SC the calculated activation energies for rotational diffusion of 16-doxylstearic acid changed of about 7.5 Kcal/mol, at temperatures below 54°C, to about 9.5 Kcal/mol in temperature range of 54-90°C. The activation energy for the lipid bilayer of corneocyte envelope changed of about 9.5 Kcal/mol below the phase transition to about 4.7 Kcal/mol above the transition. Our results give a better characterization of the fluidity of SC, the main parameter involved in the mechanism that control the permeability of different compounds through skin.

(Support: CNPq)

## PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE VESÍCULAS DE DODAB SONICADAS A BANHO

Benatti, C.R. \* e Miola, L.\*\*

\* Depto. de Física, \*\* Depto. de Química e Geociências  
IBILCE - UNESP - S. J. do Rio Preto / SP

*Palavras-Chave:* vesículas, viscosidade, condutividade e absorvidade

A estrutura de bicamada lipídica, típica de membranas biológicas, pode ser obtida utilizando apenas moléculas anfífilas naturais ou sintéticas, graças à natureza hidrofóbica das mesmas. O agregado formado pela hidratação de anfífilos (iônicos ou não-iônicos) com duas cadeias, em geral forma vesículas com característica que dependem do método de preparação. Utilizamos sonicação a banho para o preparo de vesículas unilamelares de Brometo de Dioctadecildimetilamônio (DODAB), as quais, após preparadas foram estudadas através da aplicação de várias técnicas como: absorvidade, condutividade e viscosidade, que puderam fornecer algumas propriedades físico-químicas dessas moléculas. Os estudos das vesículas foram, na maioria das vezes, feitos em comparação com suas soluções não sonicadas. Através do gráfico da absorvidade verificamos que com o tempo de sonicação os anfífilos se reorganizam em diferentes estruturas sob efeito das ondas de ultrassom. A condutividade apresentou-se maior para a solução sonicada do que para a não sonicada, mostrando que a solução sonicada apresenta-se provavelmente de forma esférica. Resultados que foram melhor entendidos após experimentos de viscosidade. Através destas variadas técnicas, podemos afirmar que as estruturas das vesículas nas soluções sonicadas a banho e não sonicadas é provavelmente de bicamada unilamelar diferindo apenas no tamanho e geometria.

Apoio: FAPESP

## ESTUDO COMPARADO DE FIBRAS MUSCULARES ATRAVÉS DE RMN *IN VIVO* DE $^{31}\text{P}$ E HISTOLOGIA

Ana Carolina de Mattos Zeri<sup>1</sup>, Maria do Rosário Zucchi<sup>1</sup>, Tito José Bonagamba<sup>1</sup>, Tania de Fátima Salvini<sup>2</sup>, Horácio Panepucci<sup>1</sup>, Edson Luiz Gea Vidoto<sup>1</sup>, Alberto Tannús<sup>1</sup>, Cláudio César Morini<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, CEP 13560-970, São Carlos, SP. <sup>2</sup>Departamento de Fisioterapia e Terapia Ocupacional, Universidade Federal de São Carlos, Cx. P. 676, São Carlos, CEP 13565-905, SP.

**Palavras Chave:** ressonância magnética *in vivo* de  $^{31}\text{P}$ , lesão muscular, músculo esquelético.

Sinais de lesão muscular aparecem nos músculos esqueléticos de camundongos submetidos a exercícios físicos extenuantes. Neste trabalho monitoramos a relação entre as mudanças no metabolismo de fósforo em diferentes períodos após o exercício, utilizando espectroscopia por ressonância magnética nuclear *in vivo* (RMNiv) de  $^{31}\text{P}$ , e a incidência de lesão nas fibras musculares utilizando análise histológica. Camundongos foram exercitados em uma esteira com velocidade de 14m/min em dois períodos de 3 horas com um intervalo de 30 minutos entre eles. Os músculos do membro posterior direito foram analisados 0,5, 3, 5, 8 e 15 dias após o exercício. Os espectros de RMNiv mostram a concentração relativa dos diferentes metabólitos fosforados. A análise dos espectros de RMNiv em função do tempo após o exercício mostram mudanças nestas concentrações, principalmente na linha correspondente ao fósforo inorgânico (Pi), que apresentou um máximo entre 3 e 5 dias. Após a análise por RMNiv, os animais foram sacrificados e os músculos *soleus* retirados para a análise histológica. Esta análise consistiu na determinação da porcentagem de fibras lesadas, que mostrou uma alteração em função do tempo após o exercício físico, apresentando também um máximo entre 3 e 5 dias. Esta excelente correlação entre os resultados de RMNiv e análise histológica em todos os períodos após o exercício, indica que a RMNiv de  $^{31}\text{P}$  pode ser empregada para o estudo *in vivo* da recuperação de lesões musculares após exercício intenso. Além da atividade física, outros fatores tais como os hormônios tiroideanos, têm papel essencial na regulação dos músculos esqueléticos. No hipertiroidismo há aumento do número de fibras de contração rápida e no hipotiroidismo há aumento de fibras de contração lenta. Nos dois casos ocorrem alterações morfológicas e metabólicas, embora as possíveis correlações entre essas alterações e o processo de transformação das fibras não estejam ainda devidamente esclarecidas por RMNiv.

(CNPq, FAPESP)

## AGGREGATION OF WATER SOLUBLE PORPHYRINS AND ALBUMIN IN AQUEOUS SOLUTION: RESONANCE LIGHT SCATTERING STUDIES

Tania Toyomi Tominaga, Iouri Borissevitch, Hidetake Imasato and Marcel Tabak

Instituto de Química de São Carlos, USP, São Carlos, SP, Brasil

**Keywords:** resonance light scattering, water soluble porphyrins, aggregation.

The importance of porphyrins in medicine is due to their application as labels in fluorescence, radiology and Magnetic Resonance Imaging cancer detection and as photosensitizers in photodynamic therapy of cancer. Aggregation phenomena can play an important role in physico-chemical properties and photophysical behavior of porphyrins in model systems and in the organism. The aggregation changes quantum yields of fluorescence and triplet states of porphyrins and hence their efficacy as fluorescence labels and photoactive compounds in cancer therapy. There is a small amount of data on the aggregation of water soluble porphyrins in the presence of microheterogeneous biological systems.

In the present work we use the resonance light scattering, which is an extremely sensitive and selective method to detect the aggregate formation, to study the aggregation of water soluble porphyrins TPPS<sub>4</sub> and TMPyP (PPh) in the absence and presence of bovine serum albumin (BSA). We observe two types of aggregation: the BSA aggregates around the porphyrin molecule when  $[\text{PPh}]/[\text{BSA}] \leq 1$  with aggregation numbers depending on the concentration and spacial conformation of BSA molecule, and PPh aggregates on the surface of the BSA molecule at  $[\text{PPh}]/[\text{BSA}] \geq 1$ . The aggregation number depends on PPh structure and charge. Thus TPPS<sub>4</sub> forms aggregates with aggregation number =10 at pH 4.5 and =3 at pH 8.5. TMPyP does not form aggregates. These data correlate well to our optical absorption and fluorescence measurements.

(Support: CNPq, FINEP, FAPESP)

## RECONSTITUIÇÃO DE FILMES LIPÍDICOS EM BALANÇAS DE LANGMUIR.

*Márcia Cristina Lima Amorim*

*Gilberto Weissmüller*

*Paulo M. Bisch*

Programa de Biofísica Celular e de Sistemas  
Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

**Palavras Chaves:** Balança de Langmuir, Filme lipídico e pressão lateral.

Pretendemos analisar as propriedades termodinâmicas de diferentes filmes lipídicos e a modificação destas propriedades na presença de proteínas de membrana. Fazemos também a transferência de filmes lipídicos para suportes sólidos para a sua posterior caracterização.

A deposição de lipídios sobre uma subfase aquosa forma uma camada monomolecular de lipídios na interface água-ar chamada filme de Langmuir. A variação da pressão lateral exercida sobre este filme em consequência da compressão ou expansão da barreira é detectada num sensor de pressão que nos fornece uma Isoterma pressão lateral versus área. Através desta isoterma podemos estudar, por exemplo, a formação de domínios lipídicos e a influência de proteínas sobre as propriedades do filme. A Balança de Langmuir permite também a manipulação necessária por exemplo, para a transferência de filmes lipídicos para suportes sólidos. Usando esta técnica analisamos a influência de proteínas de membrana, tais como a perforina, sobre diferentes filmes de lipídios puros ou misturados.

A Balança de Langmuir permite uma análise quantitativa da interação de proteínas com a membrana, de acordo com a composição lipídica do filme. O conhecimento detalhado dos processos celulares, dos mecanismos moleculares envolvidos e das propriedades físicas e físico-químicas das membranas, são essenciais no aperfeiçoamento de estudos farmacológicos e imunológicos, como por exemplo no desenvolvimento de novas drogas e vacinas.

APOIO: UFRJ, FUJB, CNPq

## Efeito de Água na Despolimerização e Hidrólise do RNA

Renato César Caetano e Márcio Francisco Colombo

Departamento de Física, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto SP.

**Palavras Chaves:** cinética, RNase, RNA

A estrutura nativa de uma proteína em solução, é determinada pelo balanço entre as interações dos aminoácidos com o meio aquoso e das interações entre os próprios aminoácidos. Estas mesmas interações, e particularmente a interação da enzima e substrato com o solvente, devem contribuir energeticamente para a ativação, equilíbrio conformacional e com ligantes, uma vez que há diferentes graus de hidratação da proteína e dos ligantes que estão envolvidos na reação da catálise enzimática. Os cálculos de velocidade inicial foram realizadas ajustando-se a variação da densidade óptica em 300 nm versus tempo, por regressão linear. Para cada experimento cinético, a velocidade inicial foi obtida usando os valores de absorção em 300 nm no intervalo de tempo entre 1 e 5 minutos. Estudos recentes mostraram que quando a RNase A é ensaiada com RNA e sacarose, há um decréscimo de  $\ln K_m$ , indicando que há uma maior afinidade da enzima pelo substrato; nesta reação, houve a liberação de aproximadamente 102 moléculas de água. Quando a mesma enzima foi ensaiada com 2'3'citidina monofosfato cíclico e sacarose, nota-se que o parâmetro  $K_m$  praticamente não se alterou e que não houve liberação de água para a solução. Esta diferença do número de moléculas de água envolvidas em cada passo da reação, provavelmente, esta relacionada com a especificidade da reação de clivagem e não especificidade da reação de hidrólise.

Apoio Financeiro: FAPESP

## CARACTERIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA E ESTRUTURAL DA LECTINA DA SEMENTE DE JACA (*ARTROCARPUS INTEGRIFOLIA*) UTILIZANDO TÉCNICAS DE MARCADORES DE SPIN E DICROÍSMO CIRCULAR

*Joselaine Ap. M. M. Marega, Leila M. Beltramini e Otaciro Rangel Nascimento*

Departamento de Física e Informática, IFSC, USP.

**Palavras-Chave:** Ressonância Paramagnética Eletrônica, Dicroísmo Circular, Lectina

**Objetivos:** O propósito deste trabalho é estudar, através das técnicas de EPR e Dicroísmo Circular, as mudanças conformacionais que ocorrem na proteína quando esta é submetida a diferentes condições físico-químicas e a ação de agentes desnaturantes físicos (temperatura).

**Materiais e Métodos:** A lectina é purificada usando a técnica de Cromatografia de afinidade em Sepharose D-Gal a partir do extrato bruto da semente de jaca.

Depois de purificada e concentrada, a amostra utilizada para as medidas de EPR é colocada para dializar durante 24 horas em pH determinado e em seguida deixa-se incubar por 48 horas com o marcador Isotiocianato-Tempo.

**Resultados:** As medidas de EPR realizadas mostraram que o marcador de spin Isotiocianato-Tempo liga-se a jacalina em pelo menos três sítios distintos que mostram diferentes tempos de correlação rotacional.

Através das medidas de Dicroísmo Circular pudemos observar a desnaturação da proteína como um processo irreversível quando esta é aquecida. Usando amostras diluídas em tampões com pHs que variam entre 4.0 e 9.0, foi possível observar mudanças na estrutura secundária, já que a atividade ótica cresce uniformemente com o pH na região em torno de 203nm.

**Conclusão:** A análise dos resultados sugere claramente que ocorrem mudanças conformacionais com a variação da temperatura e mudanças no pH.

(CNPq)

## INTERAÇÕES MAGNÉTICAS NOS SAIS DE COBRE-DIPEPTÍDEOS GLI-TRP:Cu<sup>2+</sup> E TRP-GLI:Cu<sup>2+</sup>.

*Antonio José da Costa Filho<sup>1</sup>, Otaciro Rangel Nascimento<sup>1</sup> e Rafael Calvo<sup>2</sup>*

1- Departamento de Física e Informática, IFSC, USP.

2- Departamento de Física, Faculdade de Bioquímica e Ciências Biológicas, INTEC, UNL.

**Palavras-Chave:** Ressonância Paramagnética Eletrônica, sistemas cobre-dipeptídeos, interação de troca.

**Objetivos:** Derivados metálicos de aminoácidos podem ser usados como modelos simples para estudar o comportamento de íons metálicos presentes em metaloenzimas, coenzimas e proteínas. Em metaloproteínas observa-se que, em geral, os íons estão situados em posições nas quais ocorrem fenômenos importantes relacionados à sua função biológica. O principal objetivo dessas investigações é avaliar as magnitudes dos parâmetros de acoplamento entre centros paramagnéticos (via interação de troca) e relacioná-los com os caminhos químicos de supertroca.

**Materiais e Métodos:** Foram feitas medidas de RPE, à temperatura ambiente, usando-se duas frequências de microonda: 9 e 35GHz em monocristais dos complexos de Cobre(II). Tanto a simetria local vista pelo metal quanto a interação de troca entre os centros paramagnéticos são obtidas pela análise dos espectros utilizando-se a Hamiltoniana de Spin adequada.

**Resultados:** O tensor giromagnético reflete a estrutura cristalina e as propriedades eletrônicas dos íons Cobre(II). A variação da largura de linha observada é atribuída às interações magnéticas, sendo estreitadas pela interação de troca entre os íons de Cobre. Considerando a ressonância colapsada por interação de troca, avaliamos o parâmetro de troca  $J$  entre íons não-equivalentes em uma cadeia de spin.

**Conclusão:** De posse do tensor giromagnético e larguras de linha determinamos as propriedades eletrônicas e a magnitude das interações magnéticas, bem como a possibilidade de transferência eletrônica.

(FAPESP)

## ESTUDOS DE NITROSIL HEMOPROTEÍNAS DESNATURADAS POR RPE

O.C. ALVES<sup>1</sup> e E. WAJNBERG<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal Fluminense - RJ

<sup>2</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ

**Palavras-chave:** Nitrosil-hemoproteínas, desnaturação, conformações

O óxido nítrico (NO) se liga reversivelmente nas hemoproteínas com o ferro na forma  $Fe^{+2}$  em atmosfera anaeróbica, e é usado como um possível modelo para a ligação do oxigênio, com a vantagem de poder ser estudado por RPE, uma vez que o grupo NO apresenta um elétron desemparelhado. O estudo do processo de desnaturação das proteínas, através do qual a molécula perde sua função, é importante na compreensão das forças que estabilizam as moléculas na sua conformação nativa. O conhecimento da estrutura eletrônica do íon Fe é essencial para a compreensão da base estrutural do mecanismo de ação da proteína. Utilizando um espectrômetro de RPE convencional podemos obter informações sobre a estrutura da hemoproteína de duas maneiras: através da dependência com a temperatura do tempo de relaxação spin-rede e da dependência com a temperatura do próprio espectro de RPE. A investigação do mecanismo de relaxação spin-rede de NO-hemoproteínas desnaturadas nos fornece informações sobre excitações e dinâmicas de sua estrutura rompida, que podem ser comparados com os resultados para as estruturas nativas, visando um maior conhecimento da relação estrutura-função destas proteínas. A análise da dependência com a temperatura do espectro de RPE de diferentes amostras de HbNO e MbNO (nativa, desnaturada, liofilizada e em glicerol) nos indica as diferentes conformações destas hemoproteínas e os parâmetros termodinâmicos de equilíbrio entre as mesmas. O funcionamento de uma proteína pode também ser estudado em função de sua dinâmica. Em hemoproteínas estes estudos são realizados através de experimentos de fotodissociação. A cinética de fotodissociação e recombinação de nitrosil hemoproteínas pode ser feita através do monitoramento da intensidade do sinal de RPE. Neste trabalho apresentaremos os resultados destes experimentos comparando-os com os das amostras nativas, discutindo a importância da estrutura nativa no processo de ligação Fe-NO.

## SORÇÃO DE COBRE EM FOLHAS DE CHÁ PRETO

I.P.B.Lopes, M.G. de Oliveira, R.P. de Carvalho

Dep. Física - ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais - Belo Horizonte, MG

**Palavras-chave:** biossorção, cobre, ressonância paramagnética

A biossorção consiste na sorção de íons metálicos a partir de soluções aquosas por sorbentes derivados de material biológico, vivo ou seco. Estudos de biossorção visam estabelecer o comportamento sortivo das biomassas para diversos materiais, para uso em filtros de despoluição industrial e recuperação de metais.

Estudamos a biossorção de cobre em folhas secas de chá preto (*Thea sinensis*). Medidas de concentração do metal feitas por Espectroscopia de Absorção Atômica mostram uma sorção efetiva, provavelmente devida a um fenômeno de adsorção, onde o íon metálico ocupa sítios na parede das células da biomassa. Para esclarecer o tipo de vizinhança do íon adsorvido foram feitas medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica em amostras de *T. sinensis* carregadas com cobre. Os espectros obtidos são típicos de íons de cobre em sítios de simetria quadrática planar, com quatro vizinhos idênticos ou diferindo dois a dois. Os elementos mais prováveis como vizinhos são 4 oxigênios, 4 nitrogênios ou 2 oxigênios e 2 nitrogênios. A dessorção do cobre feita em meio ácido mostra que é possível recuperar parte do metal e que o remanescente conserva a vizinhança descrita acima. O tratamento da biomassa em meio básico modifica a vizinhança dos íons sem provocar dessorção.

Concluimos que folhas de *T. sinensis* podem sorber íons de cobre, que ocuparão sítios bem definidos nas paredes das células da biomassa, e que esses íons podem ser parcialmente recuperados com tratamento ácido.

(FINEP, CNPq, Fapemig, PRPq-UFMG)

## DOSIMETRIA POR RPE DE FRUTAS IRRADIADAS

Edgar Francisco O. de Jesus \* ; Alexandre da Malta Rossi \*\* ; e Ricardo Tadeu Lopes \*

\*Laboratório de Instrumentação Nuclear COPPE/UFRJ- CP 68509 Rio de Janeiro CEP 21949-900 ; \*\* CBPF- Rua Xavier Sigaud 150, Urca Rio de Janeiro CEP 22290-180

*Palavras Chave:* RPE, Irradiação de Alimentos, Dosimetria.

Nos últimos anos, Ressonância Paramagnética Eletrônica tem sido muito utilizada para a identificação e a dosimetria de alimentos irradiados, através dos radicais produzidos nos alimentos pela radiação, existindo atualmente protocolos para identificação e dosimetria de um grande número de alimentos, principalmente para os que contém matriz sólida (ossos em carne, espinha em peixes, etc.). A presença de água tem sido apontada como um fator de limitação para a aplicação da técnica, pois como os radicais livres são altamente reativos, em meio aquoso eles se recombinariam rapidamente não permitindo sua detecção, o que tem impedido que a RPE seja utilizada de modo eficiente na identificação e dosimetria de produtos como frutas e legumes. Neste trabalho apresentamos estudos realizados em frutas (papaias, mangas, bananas, pêra e maçã), que possuem alto teor de umidade. Nestas amostras, através da liofilização da polpa a baixa temperatura, procura-se remover a água dos tecidos sem provocar danos a parede celular. As amostras são estudadas por RPE antes e após as irradiações para obter-se as linhas devidas aos radicais introduzidos pela radiação. Nas amostras não irradiadas a remoção da umidade provoca o aparecimento de uma espécie paramagnética (A) com fator g de 2.0033. Nas amostras irradiadas além desta espécie pode-se observar o aparecimento de duas linhas (B) distanciadas de 6 mT. Alguns autores sugerem que esta espécie é de fato um triplete [01,02] (com interação hiperfina de 3 mT). As amostras liofilizadas de papaias foram submetidas a irradiações com doses sucessivas entre 100 e 1500Gy. Observou-se que a intensidade pico a pico das linhas da espécie (B) variam linearmente com a dose nesse intervalo.

[01] de Jesus, E.F.O.; Rossi, A.M. and R. T. Lopes, R.T.(1995); "Influence of Sample Treatment on ESR Signal of Irradiated Citrus"; *Applied Radiation and Isotopes*, aceito para publicação

[02] Raffi, J.J., and Agnel, J-P.L. (1989) "Eletron Spin Ressonance identification of irradiated fruits". *Radiat. Phys. Chem.* Vol. 34 No. 6, 891-894

## PHOTOINHIBITION AND TEMPERATURE DEPENDENCE IN PHOTOINDUCTION CURVES OF EUCALYPTUS PLANTS AS STUDIED BY THE PHOTOACOUSTIC TECHNIQUE

P. R. Barja, A. M. Mansanares, E.C.da Silva  
Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP,  
CEP 13083-970, Campinas, São Paulo, Brasil

*Keywords:* photoacoustics, photosynthesis, open photoacoustic cell

In the last fifteen years, scientists have used the photoacoustic technique in the study of vegetable systems. Using the *open photoacoustic cell* (OPC), one can measure photosynthetic parameters as oxygen evolution and energy storage for *in vivo* and *in situ* samples (plant leaves). Our experimental setup includes a Xenon arc lamp, a monochromator and a chopper to provide modulated light, used to induce photosynthesis reactions; a halogen lamp provides strong light for photosynthesis saturation. Experimental results suggest that temperature has a major influence on the photosynthetic induction curves for eucalyptus plants. Our study also shows the observation of the photoinhibition phenomena through photoacoustics. Photoinhibition, in this case, is stimulated by exposure of the sample to excessive irradiance. Photoacoustic measurements performed in three different species of *Eucalyptus* plants previously dark adapted at different temperatures show the influence of the temperature in the photosynthetic induction curves. The experimental data for each measurement were adjusted by a logistic S-shaped curve. For the three species studied (*E.grandis*, *E.urophylla* e *E.urograndis*), the characteristic time  $t_{1/2}$ , for which the photobaric signal reaches half of the steady-state level, was shorter for 10°C than for 25°C. A possible explanation for this behavior would be the lower coupling between the electron transportation chain and the ATP synthesis cycle at low temperatures. This lower energy transfer to the ATP cycle could accelerate the induction process. Incidence of background saturating light of various intensities allows the study of photoinhibition in eucalyptus plants. Measurements show that the photosynthetic activity decreases after exposure to fifteen minutes of saturating light; this photoinhibition depends on the saturating light intensity. From data we conclude that the response of the eucalyptus plants to strong irradiance connotes a kind of stress. The authors thank professors A.C.N.Magalhães and P.C.A.Alves for the discussions and CNPq, for financial support.

## POROUS GLASSY CARBON FOR BIOMATERIALS APPLICATIONS

*M. G. Rodrigues\**, *R. L. Zimmerman\**, *D. Ila\*\**, *G. M. Jenkins\*\** and *H. Maleki\*\**

\*University of São Paulo, Ribeirão Preto, SP 14040-901 Brazil

\*\*Alabama A&M University, P. O. Box 1447, Normal, AL 35762 USA

**Key Words:** Carbon, Polymeric Carbon, Drug Delivery

To produce glassy polymeric carbon (GPC) a liquid resol ( $C_7H_6O_2$ ) is converted to fully cured phenolic resin ( $C_7H_6O$ ) by heating to 200 °C. This resin further transforms without disruption into polymeric pure carbon by heating in inert gas. The transformation from an electrically insulating resin to a conductor occurs for heat treatment temperatures (HTT) between 500 and 575 °C. For HTT around 700 °C, the material is porous (density 1.4) and permeable with hardness approaching that of diamond. At higher HTT, up to 2800 °C, the GPC retains its permeability, its mechanical and electrical properties, and is completely impermeable. The biocompatible nature of GPC together with its porosity makes it an ideal material for dual purpose prosthesis and drug delivery capsule. We have measured by Nuclear Reaction (NRA) and Chemical Analysis the impurities (O and H) and the possibility of sequestering Li in the pores of GPC prepared with various HTT.

(This work has been supported by FAPESP, CNPq and CAPES and by the Center for Irradiation of Materials at Alabama A&M University)

## NITROSIL HEMOPROTEÍNAS: UM ESTUDO POR EPR EM BANDA Q

*Marco Flores, Eliane Wajnberg e George Bemski*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ

**Palavras-Chave:** nitrosil hemoproteínas, epr, subestados conformacionais

As hemoproteínas representam um grupo de proteínas de grande importância para os biólogos e físicos, transformando-se em moléculas modelo da biofísica. Têm sido estudadas intensamente por EPR em banda X na forma nitrosilada, tendo pouca informação de medidas em banda Q, onde a resolução do espectro é melhor. Os espectros EPR em banda Q de Nitrosil Hemoglobina (HbNO) e Nitrosil Mioglobina (MbNO) foram estudados em função da temperatura, na faixa entre 19 K e 200 K. Encontrou-se que os espectros de ambas proteínas nitrosiladas apresentam dois tipos de mudanças em função da temperatura. A primeira pode ser associada a existência de duas espécies paramagnéticas, uma com simetria rômica e outra com simetria axial. E a segunda, é observada pelas variações nos valores dos fatores g e as larguras de linhas; para a espécie rômica associada à variação de orientação do ligante Fe-NO e para a axial como à variação na distância entre Fe e N da histidina próxima (E7). Ambos tipos de mudanças espectrais foram reproduzidas computacionalmente. As mudanças foram correlacionadas com subestados conformacionais, tomando o modelo mínimo proposto por Ansari como modelo padrão. Também estudou-se a dependência com a temperatura da relaxação spin-rede para MbNO, usando o método de saturação de onda contínua. Os resultados foram ajustados usando dois modelos:  $T^n$  e  $e^{-\Delta/T}$ , obtendo-se  $n=2.7$  e  $\Delta=28 \text{ cm}^{-1}$  para a componente rômica, e,  $n=3.2$  e  $\Delta=35 \text{ cm}^{-1}$  para a componente axial. Os resultados podem ser correlacionados às mudanças entre duas geometrias em equilíbrio, sem poder distinguir o tipo de processo, no primeiro caso ao modelo de tunelamento entre dois estados localizados (TLS) e no outro ao cambio na orientação do ligante da heme.

(CAPES, CBPF)

## A TERMODINÂMICA DE NÃO EQUILÍBRIO APLICADA AO PROCESSO DE SEDIMENTAÇÃO

*Francisco José Pereira Lopes* - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

*Maria Célia Pires Costa* - Universidade Federal do Maranhão

*Paulo Mascarello Bisch* - Instituto de Biofísica - UFRJ

**Palavras-Chave** : sedimentação, equilíbrio, termodinâmica.

O processo de sedimentação em ultracentrífuga tem se mostrado uma importante técnica de separação e determinação do peso molecular de macromoléculas, tendo o auge de sua aplicação ocorrido na década de sessenta. Atualmente, a evolução tecnológica e o conseqüente aprimoramento de equipamentos tem contribuído de maneira decisiva à uma sistemática reutilização desta técnica.

No presente trabalho aplicamos o formalismo local da termodinâmica de não-equilíbrio, de tal forma a obtermos uma descrição matemática um tanto quanto mais geral e dotada de maior grau de precisão do que a conhecida formulação matemática do processo de sedimentação, desenvolvida por Svendberg, na forma de uma equação diferencial. Assim obtemos uma equação alternativa capaz de descrever o equilíbrio de sedimentação, sendo escrita numa forma mais conveniente, no sentido de permitir uma inédita solução analítica, que também é apresentada. Sendo tal solução obtida na forma de uma equação algébrica, podemos, a partir desta, descrever o processo de sedimentação baseados nos parâmetros de maior conveniência, de acordo com as condições experimentais de aplicação da teoria, tais como a distribuição da densidade de massa ou densidade molar, bem como a fração de massa ou a fração molar. A equação algébrica obtida nos permite também descrever o gradiente de pressão como função do campo de centrifugação e das concentrações. Podemos também descrever a variação do coeficiente de compressibilidade da solução, restrita ao caso de soluções formadas por um único soluto, ou seja, sistemas de dois componentes.

(CNPq)

## LIGHT-DARK ADAPTATION OF BACTERIORHODOPSIN IN PURPLE MEMBRANES IS CHANGED BY DIPYRIDAMOLE

*Galina P. Borissevitch<sup>1</sup>, Iouri E. Borissevitch<sup>2</sup> and Marcel Tabak\*<sup>2</sup>*

1-Instituto de Física de São Carlos USP, 2-Instituto de Química de São Carlos USP - SP

**Palavras-chave**: bacteriorhodopsin, light-dark adaptation, dipyrindamole

Bacteriorhodopsin (bR) is a unique protein present in purple membranes (PM) of halophilic bacteria *Halobacterium salinarium*. Its chromophoric group, retinal, exists in two conformational states: 13-cis- and all-trans-. Dark adapted (DA) bR contains equimolar quantities of both retinal conformations while in light adapted (LA) bR only all-trans retinal is present. The process of light adaptation is reversible.

The process of dark-light adaptation depends on the phase state of the membrane. In PMs partly solubilized by detergents or dehydrated the depth of cis-trans transformations of retinal is decreased and a certain amount of 13-cis retinal is always present in LA PM.

Recently we have shown that the well-known vasodilator and antitumor drug coactivator dipyrindamole (DIP) binds to model membrane systems (detergent micelles, lipid Langmuir monolayers, lipid vesicles) and changes their phase state.

DIP incorporation into PMs is confirmed by the  $pK_a$  shift of its protonation towards higher pH values which is characteristic for binding with negatively charged systems and by its fluorescence spectra which are similar to those observed in anionic SDS micelles at  $pH < 5.0$  where almost all the bound DIP is protonated. At the same pH the bR dark adaptation in PM was accelerated. The depth of the transformations controlled by the position of the absorption maximum and its amplitude increases with the increase of the DIP concentration.

This indicates that protonated DIP bound to PM changes the primary photoprocesses in bR manifested macroscopically as dark-light adaptation. We consider this effect to result from phase changes in the purple membrane induced by DIP incorporation.

(Support: CNPq, FINEP, FAPESP).

## MONOCAMADAS DE LANGMUIR DE FOSFOLÍPIDIOS-ANESTÉSICOS LOCAIS CO-ESPALHADOS

*Ailton Cavalli<sup>1</sup>, Galina Borissevitch<sup>1</sup>, Marcel Tabak<sup>2</sup> e Osvaldo N. Oliveira Jr.<sup>1</sup>*

1- Instituto de Física de São Carlos USP,  
2 Instituto de Química de São Carlos USP, SP

*Palavras chaves:* Anestésicos locais, lipídios, monocamadas de Langmuir, cospreading

Estudos da interação entre fosfolípidios e anestésicos locais vem sendo realizados por várias técnicas, para se entender o mecanismo da anestesia. A técnica de Langmuir, na qual uma camada monomolecular de materiais anfílicos é formada sobre uma subfase aquosa, é uma alternativa atraente por possibilitar controle molecular. Neste trabalho apresentamos uma comparação entre dois conhecidos anestésicos locais: tetracaína (TTC) e dibucaína (DIB), que formam monocamadas estáveis quando misturados à fosfatidil colina (DPPC), em soluções de clorofórmio. Medidas em pH 4,6,11 e com força iônica da subfase constante em 10 mM de Na<sup>+</sup> foram realizadas. Os objetivos são: i) estimar a localização da droga com relação às cadeias de hidrocarbonos; ii) investigar a afinidade entre o anestésico local e o DPPC. Tais informações podem ser vitais para a compreensão do bloqueio do impulso nervoso causado pelos anestésicos.

(suporte: CNPq, FAPESP, FINEP, CAPES)

## ESTRUTURAS DISSIPATIVAS EM CÉLULAS DE DIÁLISE : ANÁLISE E TRATAMENTO DE IMAGENS

*Katya Maria Oliveira de Sousa, Gilberto Weissmüller, Paulo M. Bisch*

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

*Palavras Chaves:* estruturas dissipativas, osmocentrifugação, análise de imagens

Sistemas longe do equilíbrio termodinâmico podem apresentar transições de um estado desordenado para um estado de auto-organização temporal e/ou espacial denominado de estrutura dissipativa. As células de Bernard e a reação Belousov-Zhabotinsky são exemplos clássicos destas estruturas discutidas amplamente na literatura. Recentemente foi mostrada a formação de estruturas dissipativas em experiências de osmocentrifugação em células de diálise. Experimentos de osmocentrifugação zonal de amostras de hemoglobina em gradiente de densidade apresentaram estruturas espaço-temporal bem definidas. Neste trabalho analisamos quantitativamente a formação das estruturas dissipativas obtidas nestes experimentos. A metodologia consiste de: 1) produção de membranas assimétricas de acetato de celulose; 2) montagem de células de diálise; 3) obtenção de gradiente de densidade (Ficoll-Sacarose); 4) osmocentrifugação zonal de amostras de hemoglobina; 5) tratamento matemático das imagens fotográficas obtidas a partir dos experimentos. O tratamento matemático permite separar o efeito de difusão do processo de formação das estruturas. Pode-se, então estimar o coeficiente de difusão da hemoglobina, a posição das estruturas e os fluxos no interior da célula de diálise. Os resultados demonstraram que: 1) o alto valor encontrado para o coeficiente de difusão indica que existe um acoplamento entre processo difusivo e a sedimentação das partículas de proteínas; 2) as posições das bandas não variam no tempo, entretanto suas intensidades relativas diminuem, tendendo a uma situação onde os padrões desaparecem; 3) conseqüentemente os fluxos formadores das estruturas diminuem em função do tempo, provavelmente levando o sistema para um estado de equilíbrio.

Apoio: CNPq

## ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS ENTRE MOLÉCULAS ORGÂNICAS USANDO ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCÊNCIA

*Nilva Lúcia Lombardi Sales*

Grupo de Biofísica, IFSC, USP, SC

**Palavras-Chave:** transferência de elétrons, fluorescência, porfirina/quinona

Existe um interesse de se simular a reação de fotossíntese em laboratório devido à sua importância na natureza. E uma das etapas mais importantes deste processo ocorre quando uma molécula de clorofila absorve energia luminosa (do sol) e transfere elétrons para outras moléculas. Esta fase é conhecida como transferência de elétrons. Como se sabe, a transferência de elétrons é um processo que compete diretamente com a fluorescência. Assim, podemos estudar em laboratório esta etapa da fotossíntese usando a técnica de espectroscopia de fluorescência. Além da técnica, ainda é preciso escolher moléculas que façam o mesmo papel da clorofila. No nosso caso, usamos fitolocianinas, porfirinas e quinonas que são moléculas orgânicas encontradas na natureza e que, como a clorofila, também são corantes.

Nosso objetivo então é o estudo da supressão de fluorescência devido a transferência de elétrons; usando as fitolocianinas e as porfirinas como doadores de elétrons e as quinonas como aceitadores. O processo será estudado tanto em solução como em meio polimérico. O estudo das soluções é melhor para o aprendizado das técnicas por ser um sistema de preparação fácil e rápida. Já o estudo dos filmes apesar de ser mais lento, é também mais interessante por ter aplicações na área de eletrônica molecular. Os dados obtidos neste projeto serão analisados segundo modelos de supressão de fluorescência já existentes na literatura.

Até o momento já ajustamos o modelo de Stern-Volmer para os dados obtidos em soluções de fitolocianina (PC) com dicloro-dicianobenzoquinona (DDQ) e de Zn-tetrafenilporfirina (Zn-TTP) com duroquinona (DQ). Em filmes já temos dados da Zn-TTP com os dois aceitadores (DDQ e DQ) e estamos estudando estes dados com base nos modelos de distribuição aleatória das moléculas no meio polimérico.

(FAPESP - CNPq)

## PAPEL DAS CÁPSULAS DAS ALGAS *NEPHROCYTIUM LUNATUM* E *SPONDYLIOSIUM PANDURIFORME* NO TRANSPORTE DE MOLÉCULAS: UM ESTUDO COM RPE.

*Cristina Souza Freire Nordi<sup>1</sup>, Marina Silveira<sup>2</sup> e Otaciro Rangel Nascimento<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>-Departamento de Física e Informática, IFSC, USP.

<sup>2</sup>- Laboratório de Microscopia Eletrônica, Instituto de Física-USP/São Paulo.

**Palavras-Chave:** Ressonância Paramagnética Eletrônica, transporte de moléculas, cápsula algal.

**Objetivos:** O propósito deste trabalho é estudar o sistema de transporte de moléculas através da cápsula das algas *Nephrocytium lunatum* e *Spondyliosium panduriforme*, utilizando-se a técnica de RPE e diferentes marcadores de spin.

**Materiais e Métodos:** As algas são cultivadas axênicamente em meio WC, sob condições controladas de temperatura, iluminação e ciclo claro-escuro. Os marcadores de spin utilizados foram: Tempo, Tempol, Tempone, Tempamina e Fenil-Imidazolina. A utilização desses marcadores permite a observação dos tempos de decaimento do sinal paramagnético dos mesmos, ou seja, a redução da intensidade do sinal por ter permeado para o interior da célula e ter sido rapidamente metabolizado. Também foram feitas medidas de RPE com todos os marcadores e as células algais sem cápsula, as quais foram retiradas com ultrassom.

**Resultados:** Os resultados mostraram que os tempos de permeação dos marcadores de spin utilizados através das cápsulas algais foram de ordem de magnitude diferentes, para ambas espécies de algas estudadas. As células sem cápsula apresentam a mesma ordem, mas com tempo de permeação menores.

**Conclusão:** A análise dos resultados sugere claramente que a estrutura da cápsula mucilaginosa é capaz de fazer diferenciação de tempo de trânsito entre os diferentes marcadores e portanto podemos correlacionar o tempo de permeação com o grau de hidrofobicidade dos marcadores de spin.

(CNPq)

## INTERACTION OF CHLORPROMAZINE AND TRIFLUOPERAZINE WITH IONIC MICELLES: STUDIES OF FLUORESCENCE EMISSION AND OPTICAL ABSORPTION

*Wilker Caetano and Marcel Tabak*

Instituto de Química de São Carlos, USP, C.P. 780, São Carlos, SP, Brasil.

*Palavras-Chave:* phenothiazines, micelles, optical absorption, drug-micelle interaction

Chlorpromazine (CPZ) and trifluoroperazine (TFP) are phenothiazine derivative drugs used in medicine as efficient antipsychotics. In the last 10 years, a lot of studies of the interaction of phenothiazine drugs with models of natural and artificial membranes have been made with different techniques, but the mechanism of the action of the drug at the molecular level remains still to be understood. In the present work studies of optical absorption and fluorescence emission of TFP and CPZ as a function of pH in homogeneous solutions (buffer) and in ionic micelles was made. Spectrophotometric titrations allowed the values of pKa of TFP and CPZ in zwitterionic micelles of N-hexadecyl-N,N-dimethyl-3-ammonio-1-propanesulfonate (HPS), cationic micelles of cetyltrimethylammonium chloride (CTAC) and anionic micelles of sodium dodecylsulfate (SDS) to be obtained. The values of pKa of the TFP and CPZ in buffer are respectively  $6.8 \pm 0.7$  and  $9.3$ . These values change respectively to  $3.6 \pm 0.6$  and  $8 \pm 1$  in HPS 40 mM; to  $2.9 \pm 0.3$  and  $7 \pm 1$  in CTAC 80mM, to  $4.4 \pm 0.4$  and  $10 \pm 1$  in SDS 100mM. Measurements of fluorescence emission for the determination of these pKa values were not made due to the time dependent changes of emission. These time dependent changes are probably a result of TFP and CPZ photodecomposition. TFP association constant values ( $K_b^+$ ) at pH 5.0 in the micelles was also estimated. The  $K_b^+$  values obtained in HPS, SDS and CTAC are respectively  $674 \pm 10$ ,  $389 \pm 40$  and  $326 \pm 27 M^{-1}$ . Our results suggest only a small dependence of the phenothiazine association constants to the micelles with the charge and a great hydrophobicity of TFP and CPZ. The results suggest also that TFP is more hydrophobic than CPZ, having a greater change of pK associated with the medium.

Support: FAPESP, CNPq, FINEP.

## DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL DA ANIDRASE CARBÔNICA BOVINA

*Regiane Burger, Ignez Caracelli, Glaucius Oliva & Wanda D. Perussi de Jesus*

Departamento de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos-USP

*Palavras Chaves:* anidrase, cristalografia e estrutura

A anidrase carbônica é uma enzima que catalisa a reação de hidratação do  $CO_2$ , e está presente em bactérias, vegetais, vertebrados e invertebrados. A proteína foi purificada no laboratório do Prof. Arnaldo Simões (Dep. Bioquímica, Faculdade de Medicina de Riberão Preto, USP). Os experimentos de cristalização foram feitos à  $18^\circ C$ , e os cristais foram obtidos utilizando a técnica de *hanging drop*. A solução do poço foi variada de 53 à 56% de 50mM TRIS saturado com sulfato de amônia, pH 7,75 à 8,0. Os dados que originaram o modelo final da proteína, foram coletados utilizando-se um detector de área (difratômetro automático R-Axis IIC) monitorado por um computador da Rigaku, mostrando que a proteína cristalizou no grupo espacial monoclinico C2 com os seguintes parâmetros:  $a=127,80 \text{ \AA}$ ,  $b=48,74 \text{ \AA}$ ,  $c=98,73 \text{ \AA}$  e  $\beta=122,5^\circ$ . O processamento dos dados coletados forneceu um conjunto de dados com uma resolução de aproximadamente  $2,5 \text{ \AA}$  e uma completude de 70%, com  $R_{merge}=7,48\%$ . A estrutura foi resolvida pelo método de substituição, utilizando a estrutura da Anidrase Carbônica Humana, a  $1,54 \text{ \AA}$  de resolução. O refinamento foi realizado utilizando o pacote de programas X-PLOR, com  $R_{final}=20,6\%$ . Observou-se que existe a coordenação tetraédrica para o íon zinco, com uma molécula de água e três histidinas participando da coordenação, como apresentado na estrutura da enzima humana. Foi proposto um modelo teórico para a ligação do inibidor piridoxal fosfato à enzima bovina, através de estudos baseados em interações com o resíduo K169, utilizando o programa DOCK3.5. (FAPESP)

**SPREADING OF GIANT VESICLES ON PROTEIN-COVERED SUBSTRATES  
BY FINGERING: A REFLECTION INTERFERENCE CONTRAST  
MICROSCOPY STUDY**

*Gilberto Weissmüller<sup>1</sup>, Toni J. Feder<sup>2</sup>, Erich Sackmann<sup>2</sup>*  
Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho<sup>1</sup> - UFRJ  
Technical University of Munich<sup>2</sup> - Germany

*Palavras Chaves:* RICM, Spreading, viscous fingering

The spreading of simple pure liquids and polymer solutions on solids has gained much attention in recent years motivated mainly by the important role wetting phenomena play in technical processes. Wetting phenomena involve interesting and rich physics, yielding important insights into interfacial interactions, hydrodynamic instabilities and viscous fingering. The spreading of giant vesicles of neutral phospholipids on avidin-covered solid substrates is studied by reflection interference contrast microscopy (RICM). Contact formation, bilayer-substrate separation distances and edge profiles are evaluated. The spreading occurs in two steps: advancement of lobes of average thickness  $\sim 70$  nm by fingering, sometimes followed by thinning to  $\sim 30 \pm 10$  nm, determined by interfacial forces, and resulting in a pancake-like shape. The average advancement speed of the fingers appears constant at early times ( $\sim 0.2 \mu\text{m/s}$ ) and slows down at a later stage. Locally the bilayer advances stepwise owing to discontinuous water expulsion. The spreading is impeded by pinning centers resulting in fjord formation. The vesicle spreading is tentatively interpreted in terms of the classical theory of viscous fingering.

Apoio: CNPq

## Emissão visível e infravermelha do defeito $\text{Yb}^{2+}/\text{CN}^-$ em KI e KBr

*Antonio Carlos de Castro, Máximo Siu-Li, Antonio Carlos Hernandez, José Pedro Andreetta*  
Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* halogenetos alcalinos, defeitos, terras raras

Cristais de KI e KBr dopados com  $\text{Yb}^{2+}/\text{CN}^-$  apresentam uma forte emissão visível acompanhada de emissão vibracional. Os cristais foram crescidos pela técnica de Czochralski, em cadinhos de alumina de alta pureza e atmosfera inerte com concentração nominal de 1% de KCN e 0,5% de  $\text{YbCl}_3$  ou  $\text{YbBr}_3$ . Com bombeio em 350,7nm, além da emissão eletrônica do ion  $\text{Yb}^{2+}$ , observa-se uma forte emissão assimétrica entre 450 a 700nm, com intensidades máximas em 530 para o KI e 540nm para o KBr, à temperatura ambiente. À temperatura de 100K estes picos deslocam-se para 544 e 556nm, respectivamente, e sofrem um estreitamento (9% no KI e 30% no KBr) que revela uma banda menos intensa em torno de 490nm. Nesta temperatura, a emissão apresenta quatro regiões com comportamentos distintos quanto ao tempo de decaimento. Para o KBr, o tempo de decaimento é 0,35ms em 500nm, aumenta para 0,75ms em 540nm, diminui para 0,66ms em 590nm e volta a crescer para 0,73ms em 700nm. À temperatura ambiente há um mínimo em 460nm (20 $\mu\text{s}$ ) e um máximo em 600nm (50 $\mu\text{s}$ ). A emissão vibracional mostra uma estrutura em que o número de bandas resolvidas diminui com o aumento do parâmetro de rede. À temperatura do nitrogênio líquido, o KBr mostra picos em 2060 e 2075 $\text{cm}^{-1}$ , enquanto no KI a emissão vibracional é bastante simples, com apenas um pico resolvido em 2058 $\text{cm}^{-1}$ . Não são observadas as transições que indicam acoplamento com os níveis librationais, presentes na emissão do defeito em KCl, indicando que, no KI e no KBr, as moléculas de  $\text{CN}^-$  comportam-se como rotores quase livres. No KBr, os dois picos correspondem aos ramos R e P do acoplamento vibracional-rotacional. No KI, estes dois ramos não estão suficientemente separados ou alguma perturbação permite a emissão intensa do ramo Q. Este comportamento das moléculas de  $\text{CN}^-$  em KI também é observado na absorção [Seward, W.D. e Narayanamurty, V. - Phys.Rev. 148, 463 - (1966)].

FAPESP, FINEP, CNPq e CAPES.

## PRODUÇÃO DE FRAGMENTOS NEUTROS E CARREGADOS NA COLISÃO COM ÁTOMOS DE HÉLIO DE $\text{H}_n^+$ ( $n=3-11$ , ímpar) A 60keV/u

*Neide Gonçalves, Hugo Luna, Mario Barbatti, Ginette Jalbert, Nelson V. de Castro Faria*  
IF-UFRJ  
*Michel Farizon, Bernadette Farizon e Michel Gaillard*  
IPN-Lyon (França)

*Palavras-chaves:* agregados, multifragmentação, produção

A detecção evento a evento de todos os fragmentos, inclusive neutros, provenientes da colisão de um dado  $\text{H}_n^+$  ( $n=3-11$ , ímpar) com um átomo de hélio, permite a descrição completa do processo de fragmentação. Uma medida deste tipo foi realizada no IPN-Lyon, que possui uma fonte de agregados de hidrogênio. O hidrogênio, resfriado por hélio líquido, expande-se adiabaticamente no vácuo e o agregado obtido é bombardeado por elétrons dando origem a agregados neutros e carregados. Estes últimos são acelerados e separados em massa, sendo, em seguida, de novo acelerados num pós acelerador RFQ. Tendo em vista o modo de produção e a estrutura do RFQ, o feixe é pulsado. Cada cluster que se quebra numa colisão única com hélio, parte integrante de um jato de gás a pressão controlada, tem seus fragmentos carregados defletidos por um campo magnético e detetados simultaneamente por detetores de barreira de superfície. A experiência é controlada e analisada por um sofisticado sistema eletrônico rápido em que um bastidor CAMAC e um micro Macintosh são peças importantes. Por exemplo, na quebra do  $\text{H}_5^+$ , três detetores fixos registram simultaneamente  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}_2^+$  e  $\text{H}_3^+$  e um quarto detetor móvel registra o  $\text{H}_5^+$  incidente. Os neutros ( $\text{H}, \text{H}+\text{H}, \text{H}_2$ ) são detetados por um outro detetor, onde se observa picos de diferentes energias.

As seções de choque de produção de todos os fragmentos foram extraídas e particularidades relacionadas a estrutura dos agregados foram observadas. Entretanto, embora o agregado  $\text{H}_n^+$  seja formado por um caroço de  $\text{H}_3^+$  cercado por moléculas de hidrogênio, o fragmento carregado mais provável é o  $\text{H}_3^+$ , sendo a produção de  $\text{H}^+$  pequena e a de  $\text{H}_2^+$  dominante somente no caso do  $\text{H}_5^+$ .

## IONIZAÇÃO MÚLTIPLA EM COLISÕES DE ÍONS DE $H^+$ E $He^{2+}$ COM ÁTOMOS DE GÁLIO

*M. M. Sant'Anna*

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ*

*K. Lozhkin, C.J. Patton, P. McCartney, M.B. Shah, J. Geddes e H.B. Gilbody  
Department of Pure and Applied Physics, Queen's University of Belfast, U.K.*

*Palavras-Chave: ionização, gálio, colisões*

Foram medidas seções de choque de ionização múltipla de gálio por projéteis de  $H^+$  e  $He^{2+}$  na faixa de energia de 35-360 KeV/amu. As medidas foram realizadas utilizando o acelerador Van de Graaff de 2 MV da Queen's University de Belfast. Foi utilizada uma técnica de feixes cruzados incorporando espectroscopia de tempo de voo e contagem em coincidência dos produtos da colisão. Para a detecção dos íons de recuo de gálio foi utilizada uma multiplicadora de partículas e, para o feixe principal, um copo de Faraday. O feixe de gálio atômico foi obtido por evaporação em um forno previamente desenvolvido naquele laboratório e já utilizado para a produção de outros vapores metálicos. Nele o gálio é colocado em um recipiente de alumina cercado por uma pequena folha de tântalo, enrolada, a qual é aquecida fazendo-se passar por ela uma corrente da ordem de dezenas de ampère. O gálio no recipiente cercado pela folha de tântalo é então aquecido. Para garantir que a intensidade do feixe de gálio permaneça constante ele é interceptado (depois da região de colisão com o feixe principal) por um feixe de elétrons de energia constante e os íons de recuo desta colisão são também detectados em um outro detector. As seções de choque relativas a formação de  $Ga^+$ ,  $Ga^{2+}$  e  $Ga^{3+}$  são analisadas dentro do modelo de partículas independentes. É mostrada também a possível relevância de processos de duas etapas onde, após uma primeira ionização (ou ionização com excitação ou ainda dupla excitação), segue-se a ejeção de outro elétron em uma transição auger. Os dados são ainda comparados com outros obtidos anteriormente utilizando vapores metálicos de ferro e cobre.

(CNPq)

## INVESTIGATION OF THE FOURIER SPECTRUM OF $^{13}CH_3OH$ FROM 25 TO 350 $CM^{-1}$ USING THE "RITZ" PROGRAM

*J.C.S. Moraes<sup>a</sup>, D. Pereira<sup>b</sup>, A. Artemio<sup>b</sup>, G. Moruzzi<sup>c</sup>, F. Strumia<sup>c</sup>, B.P. Winnewisser<sup>d</sup>, M. Winnewisser<sup>d</sup>, I. Mukhopadhyay<sup>e</sup> and P.K. Gupta<sup>e</sup>.*

<sup>a</sup> Depto de Física e Química, UNESP-Ilha Solteira; <sup>b</sup> Depto de Eletrônica Quântica, UNICAMP; <sup>c</sup> Dipartimento di Fisica dell'Università di Pisa-Italia; <sup>d</sup> Physikalisch Chemisches Institut der Justus-Liebig-Universität, Giessen-Germany; <sup>e</sup> Laser Programme, Centre for Advanced Technology, Indore-India

*Key Words:*  $^{13}CH_3OH$ ; Assignments; Fourier Transform

The "RITZ" program has been used for the investigation of the absorption spectrum of the  $^{13}CH_3OH$  isotopomer of methanol from 25 to 350  $cm^{-1}$ . This allowed us to assign some perturbed level sequence which could not be followed by the Taylor expansions used in a previous program. Altogether, almost 14.000 lines have been assigned in the investigated region, and the energies of 3370 levels have been evaluated. We observed an already known state mixing and found evidence for two more state mixings not observed previously. Taylor expansion coefficients for evaluating the energies of the levels involved in the transitions are also given. All of the lines presented here correspond to transitions involving torsionally excited levels within the ground vibrational state.

(CNPq, FAPESP, FUNDUNESP)

## UM NOVO ESPECTRÔMETRO DE MASSA DESTINADO A REALIZAR MEDIDAS DE MULTICOINCIDÊNCIA

*Arnaldo Naves de Brito(PQ), Marco Aurelio Aguiar de Moraes (IC), João Bartolomeu P. de Andrade (IC), Amauri de Oliveira Albuquerque(IC)*  
Departamento de Física, Universidade de Brasília

Palavras - Chave : dissociação , espectro,multi coincidência

Moléculas de uma determinada amostra gasosa podem ser ionizadas utilizando-se um feixe de elétrons, raio laser ou radiação síncrotron devidamente monocromatizada. Após excitação fragmentos moleculares são formados a partir de dissociações iônicas intrinsecamente relacionadas às energias (eV) da fonte de excitação. Acelerando e detectando sucessivamente esses íons é possível construir-se um espectro de massas por tempo de voo que por sua vez é característico da amostra podendo nos informar os canais de dissociação (orbitais atômicos e moleculares) envolvidos no processo. A técnica por nós utilizada é denominada "Photo Electron PhotoIon PhotoIon Coincidence" (PEPIPICO) e permite a detecção correlacionada do "start event" (elétron ejetado na ionização) com os sucessivos "stop events" (íons de diferentes reações carga /massas dissociados). Isso é possibilitado pela disposição de duas placas detectoras de multicanais (Multi Chanel Plates) com suas faces detectoras mutuamente voltadas para si. Ambas as placas estão conectadas a um cartão de aquisição de dados FLY T.D.C. (Time to Digital Converter), que no presente espectrômetro permite uma resolução de tempo de até  $1.10^{-9}$  segundos.

Neste trabalho nos vamos apresentar um novo espectrômetro de massa que foi desenhado e construído na Universidade de Brasília. Os elementos óticos-eletrônicos neste espectrômetro foram desenhados tendo em mente fácil alinhamento quando acoplado à uma linha de luz síncrotron. A resolução de massa deste espectrômetro esta programada para 140 a.m.u. Detalhes do desenho do espectrômetro serão apresentados.

(CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DO AZULENO

*Janir S. Hickmann<sup>\*+</sup> e Raul Riveros<sup>\*</sup>*

<sup>\*</sup>Departamento de Física e Química - CCET - Universidade de Caxias do Sul - RS

<sup>+</sup>Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS

E-mail: JANIR@IF.UFRGS.BR

Palavras-chave: azuleno, espectroscopia, laser

O azuleno ( $C_{10}H_8$ ) é um hidrocarboneto extraído das flores da camomila (*matricária chamomilla*) de interesse científico devido as suas propriedades curativas e medicinais. Quando dissolvido em etanol, apresenta várias bandas de absorção na região do visível e UV (274, 340, 579, 632, 659 e 665 nm). De particular interesse é a banda de 340 nm pois possibilita a excitação do azuleno utilizando-se um laser de nitrogênio  $N_2$  (337 nm). Neste trabalho, estudamos o espectro de fluorescência do azuleno bombeado por um laser de  $N_2$ , bem como a possibilidade de inversão de população e a sua utilização como laser de corante.

(Apoio Financeiro: FAPERGS, UFRGS e UCS)

## Theoretical Investigation of Secondary-Electron-Production Cross Sections for Electron Impact Ionization of Water Molecules

Ronaldo S. Barbieri<sup>1</sup> & Débora Coimbra<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química - UFSCar

<sup>2</sup> Departamento de Física - UFSCar

*Palavras-Chave:* doubly differential cross section, water

In this work, we use a semi-empirical model described by Rudd, in 1991, that provides analytical expressions for the singly and doubly differential cross sections [1]. It was successfully employed for He [1] and H<sub>2</sub> [1,2] targets by Rudd and coworkers. The first attempt to apply such a model to targets containing more than one shell was made by Nogueira et al. [3], in 1995, for molecular nitrogen. As in the case of He and H<sub>2</sub>, model parameters for N<sub>2</sub> were obtained by fitting to experimentally available data from Goruganthu et al. [4]. Here, we use the semi-empirical model for water molecule. Data that show the angular and energy dependence of cross sections for ejection of electrons from water vapor will be provided. Experimental results measured by Bolorizadeh & Rudd [5] and Hollman et al. [6] were used for fitting, for ejection angles from 15° to 150°, at primary energies of 50-2000 eV. The range of secondary electron energies is from 2 eV to an energy equals to the primary one minus the first ionization potential of the target.

[1] M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* **44**, 1644 (1991).

[2] M.E. Rudd et al., *Phys. Rev. A* **47**, 2922 (1993).

[3] J. C. Nogueira et al., *Bras. J. Phys.* **25**, 14(1995).

[4] R. R. Goruganthu et al., *Phys. Rev. A* **35**, 540 (1987).

[5] M. A. Bolorizadeh et al., *Phys. Rev. A* **33**, 882 (1986).

[6] K. W. Hollman et al., *Phys. Rev. A* **38**, 3299(1988).

(CNPq)

## EFEITOS DE SATURAÇÃO NA EMISSÃO DE ELÉTRONS EM COLISÕES DE HE<sup>+</sup> EM VÁRIOS ALVOS

A.C.F.Santos, F. S. Jorás, M.M. Sant'Anna, W. S. Melo\*, G. M. Sigaud e E. C. Montenegro  
Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - RJ

*Palavras-Chave:* colisões atômicas, cúspide, saturação

Os espectros dos elétrons emitidos a 0° em colisões íon-átomo apresentam um pico característico chamado cúspide, centrado em torno da velocidade do projétil. Estes elétrons estão em estados de baixa energia no contínuo do projétil e seu comportamento cinemático é fortemente influenciado pelo potencial do projétil. Estes elétrons podem ser provenientes do alvo (captura eletrônica ao contínuo do projétil), mas quando o projétil possui elétrons, a maior contribuição à cúspide a estas velocidades vem da perda eletrônica. Estes elétrons do projétil são emitidos preferencialmente a 0°. Foram medidos espectros de elétrons na região da cúspide em colisões de íons de He<sup>+</sup> a 2 MeV em He, Ne, Ar, Kr, Xe, O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>. Observamos um efeito de saturação na dependência do número de elétrons da cúspide com o número atômico Z do alvo. Este efeito já foi observado [1] na dependência da seção de choque total de perda eletrônica de íons carregados em gases nobres e está presente nos cálculos em primeira ordem para a contribuição da interação elétron-elétron.

[1] A.C. F. Santos, M.M. Sant'Anna, W. S. Melo, G. M. Sigaud e E. C. Montenegro NIMB 99(1995)46-49

\*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

APOIO: CNPQ E FINEP

## ESPALHAMENTO REATIVO PARA SISTEMAS QUADRI-ATÔMICOS UTILIZANDO COORDENADAS HIPERESFÉRICA

Mônica Wolf Cadilhe, Joaquim José Soares Neto,  
Annibal Dias de Figueiredo Neto e Tarcisio Marciano da Rocha Filho

Departamento de Física - UnB  
email: marciano@helium.fis.unb.br

*Palavras chave: coordenadas hiperesféricas, espalhamento, semi-clássico*

O estudo de processos de espalhamento reativo em sistemas moleculares tem recebido muito interesses por vários pesquisadores. Os métodos de estudo desses problemas se dividem em duas grandes classes: os métodos independentes do tempo, baseados na obtenção de estados estacionários de espalhamento, e os métodos dependentes do tempo, que estudam o processo de espalhamento pela evolução temporal de um pacote de onda espalhado. Entretanto, os sistemas estudados se restringem a moléculas com dois ou três átomos. Trabalhos com quatro átomos têm se restringido ao estudo de apenas alguns graus de liberdade sendo os demais congelados. Neste trabalho estudaremos o processo de espalhamento reativo em uma molécula quadri-atômica utilizando uma aproximação semi-clássica, o que nos permitirá levar em consideração todos os graus de liberdade envolvidos. Dos doze graus de liberdade envolvidos três correspondem às coordenadas do centro de massa da molécula. Os nove graus de liberdade restantes são descritos através de um sistema de coordenadas introduzido por Öhm e Linderberg: os três ângulos de Euler com relação aos eixos principais de inércia mais uma coordenada radial e cinco angulares. As equações de movimento de Hamilton são então obtidas após várias simplificações realizadas através de cálculo simbólico. Estudamos então o espalhamento reativo de H<sub>2</sub> por O<sub>2</sub>. A resolução das equações de Hamilton é feita utilizando-se um método desenvolvido por um dos autores (A.D. Figueiredo Neto), Codutti e Brenig, que permite um controle do esforço computacional com relação à precisão desejada e à ordem do método de resolução empregado. (CNPq)

## CHARGE PRE-EQUILIBRIUM CONTRIBUTION TO THE STOPPING POWER OF FAST IONS

L.F.S. Coelho  
IF-UFRJ

*Palavras-Chave: pre-equilibrium, channeling, stopping power*

When a fast atomic beam, in a well defined charge state, incides upon a solid target it acquires an effective charge  $q(x)$ . A model proposed by Brandt *et al.*,<sup>1</sup> based on the dynamical screening model, gives  $q(x) = q_0 e^{-kx/v} + q_{\infty}(1 - e^{-kx/v})$ , where  $q_{\infty}$  is the equilibrium screened charge. For small energy losses one may define a decay length  $l_{eq} = v/k$ . Although more complex expressions could be employed,<sup>2</sup> the exponential dependence is a good approximation and has been employed in the literature.<sup>3</sup> We propose here a method for estimating  $\lambda$  by measuring the energy losses of two different initial beams. For instance, if He<sup>+</sup> and He<sup>++</sup> beams traverse a target with thickness L, their respective average energy losses being called  $\Delta E(He^+)$  and  $\Delta E(He^{++})$ , the charge pre-equilibrium effect may be given by  $r = (\Delta E(He^{++}) - \Delta E(He^+))/\Delta E(He^{++})$ . Assuming now L much larger than  $l_{eq}$  one obtains

$$r = (2q_{\infty} + 3)l_{eq}/(2q_{\infty}^2 L).$$

We employed this result to the stopping power of 2.5 MeV Helium ions channeled in the  $\langle 100 \rangle$  direction of a 6700 Å thick silicon target, recently measured by Pimentel, Acquadro and Donangelo.<sup>4</sup> At this energy  $q_{\infty}$  is nearly equal to 2, leading to  $l_{eq}$  equal to 500 Angstroms. There is a 10% uncertainty arising, mainly, from the graphical presentation of the data. A simpler model, proposed by Santos *et al.*<sup>5</sup> led<sup>4</sup> to a value of 640 Å.

- 1) W. Brandt, R. Laubert, M. Mourino and A. Schwarzschild, Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 358.
- 2) N.E.B. Cowern, P.M. Read and C.J. Sofield, Nucl. Instr. Meth B 12 (1985) 43.
- 3) B. Rosner, D.P. Almeida, L.F.S. Coelho, E.C. Montenegro and A.G. de Pinho, Nucl. Instr. Meth. B 42 (1989) 325.
- 4) L. M. Pimentel, MSc Thesis, IF-UFRJ (1996).
- 5) J.H.R. dos Santos, J.H.R. dos Santos, H. Boudinov and M. Behar, (1994) unpublished

(FINEP, CNPq)

## LASER MULTIPHOTON STUDY OF GASES AT LOW PRESSURES

*A.O. Toledo, V.H. Baggio-Scheid, A.C. Oliveira and A.M. Santos*

Instituto de Estudos Avançados -CTA - São José dos Campos - SP

*Palavras-chave:* photoionization, laser, plasma

Laser photoionization of gases has been a subject of intense theoretical and experimental study. There is a particular interest of late in using laser-produced plasmas for elemental and molecular analyses of various sample media. Among the attractive features of laser produced plasma methods are direct sampling with minimal media and speed of analysis. In this work, the results concerning the laser photoionization of He, Ar and SF<sub>6</sub> in sub-atmospheric pressures are presented. A static gas cell was used. In this way the neutral particle density could be calculated very accurately from measurements of pressure and temperature. The plasma was produced by a pulsed XeF-excimer laser ( $\lambda_L = 309$  nm,  $E_L = 15$  mJ,  $\tau_L = 10$  ns) focused by a quartz lens in the middle of the cell. Two copper electrodes placed in the center of the cell were used to monitor the plasma. The current was measured as a function of the filling gas pressure. The collected charge was, then, calculated from the time integral of the current. The total charge ranges from  $10^{-11}$  C at 10 mbar to  $10^{-10}$  C at  $10^{-2}$  mbar. Despite the significant differences in the photoionization threshold energies of Ar and He, there is only a slight dependence of the total collected charge. The abrupt decrease of the collected charge for SF<sub>6</sub> at pressures higher than 1 mbar indicates that recombination due to attachment dominates against diffusion loss. In the case of SF<sub>6</sub> beside the photoionization there is also photodissociation. This was investigated with a time of flight spectrometer, with which the fragments of SF<sub>3</sub>, SF<sub>4</sub> and SF<sub>5</sub> were observed.

## IONIZAÇÃO DO ÁTOMO DE He POR IMPACTO DE ELÉTRONS

*Amália L. Monzani\*, Luiz E. Machado\*, Lee Mu-Tao†*

\*Universidade Federal de São Carlos - Depto. Física - São Carlos - SP

†Universidade Federal de São Carlos - Depto. Química - São Carlos - SP

*Palavras-Chave:* ionização, ondas distorcidas, seção de choque triplamente diferencial.

Estudos de processos de ionização por impacto de elétrons são importantes para a compreensão do problema fundamental de partículas interagindo via forças de Coulomb. As chamadas Seções de Choque Triplamente Diferenciais (SCTD) dão informações sobre processos (e, 2e) para estados finais contendo dois elétrons do contínuo. O tratamento teórico de processos (e, 2e) é difícil porque não há uma solução analítica para a função de onda para dois elétrons movendo-se em um campo de Coulomb. Em particular, quando estes processos ocorrem próximos ao limiar de ionização, efeitos de correlação (pós-colisão) são mais evidenciados.

Neste trabalho apresentamos nossos resultados de SCTD para ionização do átomo de He por impacto de elétrons com energias incidentes de 64.6, 100 e 200 eV. Os cálculos foram realizados para a geometria coplanar simétrica, onde os três elétrons do contínuo estão num mesmo plano e os ângulos  $\theta_1$  e  $\theta_2$  das direções dos elétrons finais (relativamente à direção de incidência) são iguais. As funções de onda dos elétrons do contínuo foram determinadas usando o Método Variacional Iterativo de Schwinger com a truncagem nas expansões das funções em  $l_{\max}=10$  e  $m_{\max}=10$ . Os elementos de matriz de transição foram obtidos usando o Método de Ondas Distorcidas. Os resultados para a energia incidente de 200 eV são mais satisfatórios que aqueles de energias mais baixas. É possível que isto se deva ao fato de que em nossos cálculos não foram incluídos os efeitos pós-colisão, que são mais importantes para energias mais baixas.

(CNPq)

## SEÇÕES DE CHOQUE DE DISSOCIAÇÃO DE AGREGADOS DE HIDROGÊNIO

*Hugo Luna, Neide Gonçalves, Ginette Jalbert e Nelson V. de Castro Faria*  
IF-UFRJ

*Bernadette Farizon, Michel Farizon e Michel Gaillard*  
IPN-Lyon (França)

**Palavras-chaves:** agregado, dissociação, seção de choque

Utilizando a fonte de agregados rápidos do IPN-Lyon foram medidas seções de choque de dissociação dos agregados  $H_n^+$  com  $n=3-15$  (ímpares), 19, 21, 25, 27 e 31 e velocidade de 2,4 a.u. em colisão com átomos de hélio. Antes de atingirem o alvo, os agregados passam entre duas placas paralelas, sendo defletidos periodicamente por um campo elétrico aplicado a estas placas atingindo assim um detetor de monitoragem. O alvo é composto de um jato de hélio a pressão controlada (Baratron), montado num goniômetro de precisão. As seções de choque são obtidas a partir de dados de fração transmitida de agregados em função da pressão de hélio, sempre em regime de colisão única. Na tabela abaixo são apresentadas as seções de choque medidas  $\sigma_d$  em unidades de  $10^{-16} \text{cm}^2$ :

n	3	5	7	9	11	13	15	19	21	25	27	31
$\sigma_d$	2.64	4.38	8.04	10.31	12.94	15.87	18.32	20.53	23.68	28.68	30.30	37.03

Como esperado, a seção de choque de dissociação cresce com a massa do agregado. Embora previstas em nossos cálculos de estrutura, feitos por método ab-initio e base gaussiana, não foram observados efeitos de camadas. Tais efeitos, que são relacionados ao pequeno salto ( $\sim 0,1$  eV) entre camadas "abertas" e "fechadas", são provavelmente escondidos pela variedade de parâmetros de impacto envolvidos na colisão. Para  $n > 9$ , a seção de choque de dissociação cresce proporcionalmente a  $n$ , parecendo indicar que a molécula de  $H_2$  contribui de forma equivalente independentemente da posição em que se encontra no agregado.

## INVESTIGATION ON THE GROUND VIBRATIONAL STATE OF $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$ BY INTRACAVITY STARK SPECTROSCOPY

*J.C.S. Moraes*

Departamento de Física e Química - UNESP - Campus de Ilha Solteira

*D. Pereira*

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

*G. Carelli, A. Moretti and F. Strumia*

Dipartimento di Fisica dell'Università di Pisa-Italia

**Key Words:**  $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$ , Intracavity, Stark Effect

The present here the results of an investigation of FIR absorption spectrum of  $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$  by Intracavity Stark Spectroscopy. We use an optically pumped hybrid waveguide FIR laser with  $\text{CH}_2\text{F}_2$  as FIR active molecule and  $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$  as molecule to be studied. We observed 3 absorption lines of  $^{13}\text{CD}_3\text{OH}$  using 3 different lines of  $\text{CH}_2\text{F}_2$ . An absorption line is assigned as  $E_1$  symmetry  $(n,K,J) : (1,4,18) \rightarrow (1,5,18)$  and its frequency is measured as  $63.08631 \text{ cm}^{-1}$  with a precision of a few parts in  $10^7$ ; a tentative assignment is given for one of two other absorption lines observed.

(CNPq, FAPESP)

## DETETOR DE FOTONS DE ANIQUILAÇÃO UTILIZANDO UM FOTO-DIODO HÍBRIDO

I. Pepe

Instituto de Física - UFBA

*Palavras-chave:* detetor, foto-diodo híbrido, contagem de fótons

Historicamente a contagem de fótons é feita com auxílio de detetores de cintilação, acoplados óticamente a foto-multiplicadores (PM). Entretanto, a estrutura interna (catodo, dinodos e anodo) de tais transdutores, impossibilita o seu bom desempenho quando da presença de campo magnético. Esta susceptibilidade é mais sentida, se o campo em questão faz um ângulo não nulo com o eixo geométrico do PM.

O nosso trabalho consistiu do desenvolvimento de um novo tipo de detetor de fótons, baseado num foto-diodo híbrido (PDH). Um foto-diodo híbrido é composto por um foto-diodo de silício, montado num encapsulamento à vácuo, em face de um foto-catodo. Os fótons que chegam a superfície do foto-catodo, são convertidos em elétrons. Uma vez que estes escapam à superfície do foto-catodo, eles são acelerados por uma alta tensão, indo se chocar contra o foto-diodo de silício.

Este tipo de transdutor é antigo na concepção (anos 50), mas novo na sua implementação, graças ao avanços tecnológicos dos semicondutores.

Durante este desenvolvimento comparamos o desempenho dos PDH em relação a diferentes PM's (ex. triodo Hamamatsu R4406 ou ainda o PMT fine mesh R2490, ditos menos sensíveis a campo magnético externo). Podemos afirmar que em presença de campo os PDH apresentam performances superiores aos melhores PM's.

Entretanto, uma desvantagem dos PDH's sobre os PM's é seu baixo ganho de corrente, da ordem de  $2E3$ , em relação ao ganho de  $1E7$ , característico da maioria dos PM.

Esta dificuldade pode ser superada pela utilização de diferentes pré-amplificadores. Uma possibilidade de solução é um pré-amplificador rápido, baseada em amplificador de vídeo monolítico AD9618, de fabricação Analog Devices.

## UM ESTUDO COMPARATIVO ENTRE ALGORITMOS PARA A RECONSTRUÇÃO DE IMAGENS DE UM MINITOMÓGRAFO APLICADO À FÍSICA DE SOLOS

Paulo Estevão Crivinel<sup>1</sup> e Gilmar Cação Ribeiro<sup>2</sup>

(1) EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

(2) UFSCar-Computação, Rodovia Washington Luiz Km 235, São Carlos SP

*Palavras-Chave:* tomografia, imagem, minitomógrafo

No presente trabalho é apresentado um estudo comparativo entre algoritmos para a reconstrução de imagens de solos, a partir do uso do minitomógrafo do Centro Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação para a Agropecuária (CNPDIA) da EMBRAPA, considerando as técnicas de retroprojeção filtrada e a de reconstrução algébrica modificada com interpolação Spline. Os resultados foram analisados em função da qualidade das imagens geradas e com o conhecimento do ruído de imagens obtidas, à partir de padrões conhecidos, pôde-se estudar a adequabilidade dos algoritmos para aplicações em tomografias de amostras de solo. As imagens foram obtidas com uma resolução espacial de 2mm com 60 amostras por projeção e ângulo de 3 graus entre projeções. Utilizou-se uma fonte de Americium ( $^{241}\text{Am}$ ) com tempo de contagem de 10 segundos por amostra. Resultados mostram uma melhor adequabilidade às questões relacionadas ao contraste das imagens reconstruídas com o algoritmo baseado na técnicas de reconstrução algébrica modificada com interpolação Spline, quando comparado aos resultados obtidos com o algoritmo de retroprojeção filtrada. Entretanto, o tempo de processamento, avaliado em equipamentos computacionais com mesmo desempenho, para a reconstrução das imagens com o algoritmo de retroprojeção filtrada foi de aproximadamente 60% menor que o utilizado pelo outro algoritmo.

(EMBRAPA-CNPDIA, UFSCar e CNPq)

## Accumulation Points in Parameter Lattices of the Hénon Map

Marcus Werner Beims and Jason Alfredo Carlson Gallas  
Instituto de Física, Universidade Federal do RGS - Brasil

*Palavras-chave:* Sistemas Complexos, Sistemas Dinâmicos, Dinâmica e Caos.

We compute bifurcation cascades for the Hénon map when both parameters of the model are varied simultaneously along certain algebraic varieties. These varieties form the boundaries between domains of parameters producing stable motions of different periodicities in phase space. The varieties of the cascades beginning with the lowest possible periods,  $1 \times 2^m$  and  $3 \times 2^n$ , generate two families of parabolic-like curves that intersect in parameter space. The infinite points composing such intersection define a nonlinear lattice. Lattices like this are typical in parameter space of dynamical systems when two [or more] bifurcation cascades of periods  $k_1 \times 2^m$  and  $k_2 \times 2^n$  overlap. A recent work [1] has shown that vertices forming such nonlinear lattices are defined by very special entities: "units" in specific number fields. The precise analytical determination of the ground field and unit for each vertex becomes then a central problem for those wishing to understand the specific algebraic towers leading to the characteristic accumulation points which mark the transition from algebraic to transcendental numbers or, in equivalent languages, from regularity to chaos, from periodicity to aperiodicity. The computation of units defined by irrationalities of high degree is a quite difficult problem. Here we report [2] accurate numerical approximations of such numbers which (i) throw light in the metric properties of a dynamical system under the simultaneous variation of two parameters and (ii) provide input data for the analytic determination of the number-theoretic nature of the intersections.

1. J.A.C. Gallas, *Physica A* 222, 125-151 (1995); *Applied Physics B* 60, S-203/S-213(1995), *Festschrift H. Walther*.
2. M.W. Beims and J.A.C. Gallas, Preprint HLRZ 9/1996.

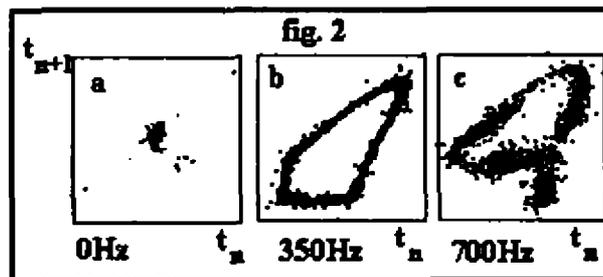
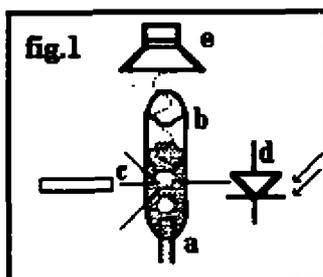
(FAPERGS, CESUP-UFRGS)

## CAOS NUM EXPERIMENTO HIDRODINÂMICO SINTONIZADO

Alberto Tufaile  
José Carlos Sartorelli  
Whilk Marcelino Gonçalves  
Instituto de Física-Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* caos, bolhas, mapas.

Em sistemas hidrodinâmicos, onde ocorre estiramento e compressão das linhas de fluxo, temos sensibilidade às condições iniciais que pode ser explicada pela teoria do caos. Desenvolvemos o experimento mostrado na figura 1, onde temos um bico (a), que borbulha ar em uma solução de glicerina e água dentro de um tubo de vidro (b). O feixe laser (c) é desviado pela passagem das bolhas e a variação da intensidade do feixe é detetada pelo fotodiodo (d), cujo sinal é transmitido a um microcomputador para aquisição dos tempos entre as bolhas. Uma onda senoidal gerada por um autofalante (e), altera o circuito das linhas de fluxo na solução, modificando o intervalo de tempo entre as bolhas, em função da frequência da onda. Obtivemos séries temporais e mapas de primeiro retorno, os mapas estão mostrados nas figuras 2a, 2b e 2c em que se nota a dinâmica do experimento em função da frequência da onda gerada. (CNPq e Fapesp)



## COMPORTAMENTO COMPLEXO NA EXPERIÊNCIA DA TORNEIRA GOTEJANTE.

*Reynaldo Daniel Pinto*  
*José Gustavo Marques da Silva*  
*José Carlos Sartorelli*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* complexidade, leis de escala, intermitência.

A torneira gotejante apresenta uma grande diversidade de comportamentos [1]. Estudamos a transição de um atrator periódico para um toro  $T^2$  em altas e decrescentes taxas de vazão, de acordo com uma bifurcação de Hopf [2]. Após um travamento de período 5, este toro  $T^2$  começa a perder a fase intermitentemente. Penna *et al.* [3], sugerem que a torneira gotejante seja um sistema crítico. Nossas tentativas de calcular o expoente de Lyapunov não foram conclusivas devido à alta sensibilidade do algoritmo ao ruído. Apesar dos cálculos da dimensão de correlação não convergirem, a dimensão do sistema calculada usando o método dos falsos vizinhos é finita e igual a 3. Neste trabalho, vamos mostrar os resultados obtidos com um método alternativo de caracterização. Em sistemas caóticos, a distância entre dois pontos inicialmente próximos evolui exponencialmente. Verificamos que a evolução da distância entre pontos próximos possui fortes componentes periódicas para todos os atratores estudados. Calculamos, então, a distância entre 2 pontos, escolhidos aleatoriamente no atrator reconstruído, e entre suas iteradas sucessivas, obtendo assim, uma nova série para cada par de pontos iniciais e verificamos novamente a ocorrência de componentes periódicas. No espectro de potências médio destas séries, observamos leis de escala, que parecem não depender da dimensão de reconstrução, e cujos expoentes variam de acordo com o tipo de comportamento qualitativo observado nos mapas de primeiro retorno. Estamos procurando associar os comprimentos característicos das leis de escala observados com o comprimento característico da intermitência das perdas de fase do sistema. (CNPq e Fapesp)

[1] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves e R. D. Pinto, *Phys. Rev.*, **E49**, 3963 (1994);

[2] R. D. Pinto, W. M. Gonçalves, J. C. Sartorelli e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev.*, **E52**, 6892 (1995);

[3] T. J. P. Penna, P. M. C. de Oliveira, J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves e R. D. Pinto, *Phys. Rev.*, **E52**, 2168R (1995).

## OPERADORES MAGNÉTICOS PARA PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DE REAÇÃO E DIFUSÃO NA REDE

*J. Ricardo G. de Mendonça e Mário J. de Oliveira*

Depto. de Física Geral do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* processos estocásticos, teoria do magnetismo

Neste trabalho mostramos como se podem construir operadores de evolução temporal para processos estocásticos de reação e difusão na rede. Introduzindo espaços lineares apropriados na descrição de sistemas clássicos de partículas interagentes, escrevemos a equação mestra como uma "equação de Schrödinger" em tempo imaginário, cujo "hamiltoniano" derivamos. O método exposto é fácil de usar e bastante geral, uma vez que permite obter corretamente os operadores para processos de  $N$  espécies interagindo através de colisões  $n$ -árias, com  $n \leq N$  arbitrários.

É claro que a construção dos operadores é a parte fácil do problema, a parte difícil sendo a determinação de seus autoespectros. Aqui é que surge a relação entre a física dos processos estocásticos e a do magnetismo, uma vez que muitos dos processos mais estudados têm por operadores de evolução, considerando-se transformações de similaridade não-locais, hamiltonianos conhecidos da teoria do magnetismo, como por exemplo o ferromagneto de Heisenberg para o processo de exclusão simples simétrico. Dessa forma, técnicas previamente desenvolvidas no contexto magnético, como argumentos de Goldstone, "ansatz" de Bethe e fermionização, se aplicam. Damos como exemplo o operador de evolução de um processo de adsorção e dessorção de dímeros com relaxação difusional, que em determinada região de seu espaço de parâmetros é exatamente solúvel em termos de férmions livres.

(CNPq)

## COMBINAÇÕES DE MAPAS DIFEOMÓRFICOS

*Alberto Tufaile*

*José Carlos Sartorelli*

*Whilk Marcelino Gonçalves*

Instituto de Física-Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* recorrência, endomorfismo, difeomorfismo

O experimento da torneira gotejante [1, 2] é um sistema dinâmico com vários graus de liberdade, mas que para baixas vazões, permite uma análise através de equações de recorrência com poucos graus de liberdade. As séries de eventos temporais,  $t_n$ , obtidas experimentalmente, são formadas com os tempos entre gotas sucessivas. Obtiendo dados numa região onde a frequência média é por volta de 10 gotas por segundo, construímos mapas de primeiro retorno tridimensionais nas variáveis  $t_n$ ,  $t_{n+1}$  e  $t_{n+2}$ . Nas projeções dos mapas tridimensionais nos planos  $t_n$   $t_{n+1}$  e  $t_n$   $t_{n+2}$ , ajustamos parábolas às curvas obtidas. Desta maneira determinamos numericamente os coeficientes  $a$  e  $b$  dos submapeamentos de difeomorfismos do tipo mapa de Henon  $f(z, y, a, b)$ , que simulam a dinâmica do atrator, combinados com uma recorrência linear  $g(x, c)$ , que dá a evolução do atrator para valores próximos do ajuste, conforme o sistema de equações:

$$f: \quad x_{n+1} = a z_n (1 - z_{n+1}) + y_n; \quad y_{n+1} = b z_n$$

$$g: \quad z_{n+1} = c x_n$$

Observamos que o coeficiente  $a$  é aproximadamente 600 vezes o coeficiente  $b$ , cuja magnitude permite a aproximação do difeomorfismo por um endomorfismo [3], do tipo mapa logístico. (CNPq e Fapesp)

1. Shaw, R., "The dripping faucet as a model chaotic system", Aerial Press(1984).
2. Sartorelli, J.C., Gonçalves, W. M., Pinto, R.D., Phys. Rev., E49, 3963(1994).
3. Mira, C., "Chaotic Dynamics", World Scientific(1987).

## Dynamical Evolution and Generalized Quantum Thermostatistics

*F. Pennini<sup>1</sup>, A.R. Plastino<sup>1,2</sup> and A. Plastino<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata,  
Casilla de Correo 727, La Plata 1900, Argentina.

<sup>2</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro

*Palavras-Chave:* Quantum Dynamics - Generalized Thermostatistics.

We discuss some interesting peculiarities of Tsallis' quantum thermostatistics in relation with dynamical evolution, with particular emphasis on the cut-off condition question. The existence of special dynamical states that do not appear in the Boltzmann-Gibbs thermostatistics is analyzed in detail. We consider a set of relevant observables that close a Lie semi-algebra with the Hamiltonian of the system. The expectation values of these observables verify a closed system of linear ordinary differential equations of motion. This system of equations can be solved analytically and we can employ, at each time  $t$ , the associated expectation values as constraints in order to construct the maximum entropy statistical operator. We prove that the time derivative of the entropy associated with this density matrix vanishes. The equations of motion verified by the Lagrange multipliers associated with the relevant operators are obtained. We prove that the time dependent Tsallis maximum entropy statistical operator constitutes an exact solution to von Neumann equation. We show that these time dependent density matrices admit, as particular cases, thermally frozen states. These states constitute dynamical generalizations of the thermally frozen states introduced by Tsallis in the context of the canonical ensemble. For these frozen states, the density matrix reduces to a projector operator onto a pure state. It is shown that some regions of the Lagrange-multipliers space are forbidden. The concomitant sets of Lagrange multipliers can not be physically realized. In this sense, dynamical generalizations of the forbidden states introduced by Tsallis in connection with the canonical ensemble, are given here. We show that the temporal evolution does not alter the nature (forbidden, frozen or active) of the dynamical states.

( CONICET and CNPq )

## ALGORITMO PARA A ESTIMATIVA DE EXPOENTES DE LYAPUNOV A PARTIR DA FUNÇÃO DE DENSIDADE DE PROBABILIDADE.

N. N. Oiwa, N. Fiedler-Ferrara.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo CP 66318 - CEP 05389 970.

**Palavras-Chave:** caos, algoritmo de contagem de caixas, expoentes de Lyapunov.

Uma das maneiras para se caracterizar a natureza caótica de fenômenos físicos é estimando-se o espectro de expoentes de Lyapunov. Contudo, os métodos disponíveis para o cálculo dos expoentes a partir de séries temporais consomem muito tempo de processamento, dificultando a análise sistemática de sinais experimentais.

Em contraste com os algoritmos existentes, que estimam os expoentes de Lyapunov valendo-se de médias temporais, propõe-se um método alternativo para o cálculo dos expoentes a partir da função de densidade de probabilidades associada ao atrator. Essa função de densidade de probabilidades é representada por um conjunto de caixas cobrindo o atrator e a probabilidade de cada caixa é dada pela razão do número de pontos contido nela mesma pelo número de pontos do atrator. Utilizou-se um algoritmo baseado no trabalho de Friedman *et al.* (ACM Trans. Math. Soft. 3, 209 (1977)) para efetuar a cobertura do atrator. Contudo, modificou-se o algoritmo de Friedman *et al.* de modo que as caixas tenham sempre o mesmo tamanho. Os expoentes de Lyapunov são calculados a partir dos autovalores da Jacobiana estimada da evolução temporal dos pontos contidos nessas caixas.

Os resultados obtidos mostram que o novo método possui relativamente a alguns aspectos um desempenho superior ao dos métodos disponíveis (Sano-Sawada, Phys. Rev. Letters 55, 1082 (1985); Eckmann *et al.*, Phys. Rev. A34, 4971 (1986); Brown *et al.*, Phys. Rev. A43, 2787 (1991)), particularmente no que diz respeito ao tempo de processamento.

(CNPq)

## BOND STABILITY CRITERION IN CHAIN DYNAMICS

Gonzalez J.A. and Oliveira F. A.

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

**Keywords:** bond stability, chain dynamics

The problem addressed in this communication is that of understanding the larger bond extensions found in the break of an anharmonic chain under stress. The result of extensive simulations in Lennard-Jones Chains shows that a bond must be extended to a considerable length before it breaks[1]. This large healing capacity of the lattice delays the process of fracture[2]. In this communication we show that the large healing capacity of the lattice is quite general non-linear phenomenon and depends on the correlation of adjacent particles. We shall prove the existence of an unstable stationary equilibrium solution that is critical for the process of fractures. We consider a solid chain under stress as a metastable state of equilibrium, in analogy with the more familiar case of supersaturated vapor. Fracture at the failure threshold corresponds to a metastability limit, or spinoidal, just as in the nucleation theory at the point of critical supersaturation.

We discuss the existence of an unstable stationary equilibrium solution that plays the role of a critical seed for the process of fracture. We obtain the critical extension values for the stability of the chain. We verify through computer simulations that the critical bond lengths are within our theoretical limits [3].

### References

- [1] F. A. Oliveira and P.L. Taylor, *J. Chem. Phys.* 101 10118 (1994).
- [2] S.S. Brenner, in *Fiber Composite Materials* (America Society for Metals, Metals Park, OH, 1965)
- [3] F.A. Oliveira and J. A. Gonzalez. *Physical Review B* - to be published.

## BIFURCAÇÃO INSTACIONÁRIA DE UM FLUIDO EM ROTAÇÃO ESTUDADA POR SIMULAÇÕES NUMÉRICAS AXI-SIMÉTRICAS

M.B. Lacerda Santos<sup>a</sup> e J.N. Sørensen<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910-900 Brasília, D.F.

<sup>b</sup> Department of Fluid Mechanics, Technical Univ. of Denmark, 2800 Lyngby, Dinamarca

**Palavras chave:** fluido em rotação, escoamento instacionário, bifurcação de Hopf.

O problema clássico de um fluido viscoso girando dentro de uma cavidade cilíndrica fechada tem atraído renovado interesse nos últimos anos, em razão de este ser um sistema adequado para se estudar rotas para o caos e turbulência. No estudo aqui focalizado, apresentar-se-á resultados de simulações do escoamento de um fluido em rotação dentro de uma cavidade cilíndrica parcialmente aberta, obtidas através de solução numérica das equações de Navier-Stokes dependente do tempo e com simetria axial. A configuração estudada consiste de um recipiente cilíndrico que contém o fluido. Este é posto em rotação por um disco em contacto com a superfície do líquido, girando a velocidade angular constante. A novidade aqui é que o disco não cobre inteiramente a superfície do líquido, deixando parte da mesma livre. Do ponto de vista de aplicações, portanto, vale ressaltar que a configuração estudada é similar a de um arranjo Czochralski para crescimento de cristais, embora efeitos térmicos não tenham sido incluídos. Num tal arranjo, o escoamento é forçado pelas rotações do cristal, aqui representado pelo disco. Como no caso da cavidade fechada, para uma certa taxa de rotação crítica o regime estacionário não é mais atingido. O estudo focaliza a ocorrência dessa primeira transição para a instacionaridade, ao considerar casos de cavidades com maior ou menor superfície livre disponível, em função do raio do cristal, para uma razão de aspecto fixa. Seguindo a evolução temporal de um pequeno número de variáveis dinâmicas arbitrariamente escolhidas, parametrizadas pelo número de Reynolds, localiza-se essa primeira bifurcação de Hopf para uma dada série de cavidades com diferentes graus de abertura. As simulações realizadas nesse trabalho demonstram que a presença de superfície livre leva a importantes alterações na transição para escoamento dependente do tempo, quer na localização da mesma, quer na dinâmica das oscilações. (Apoio parcial: CNPq)

## A RELAÇÃO ENTRE A INTENSIDADE DA IMPUREZA E A MEDIDA DO CAOS NA PROPAGAÇÃO DE PORTADORES

Paulo E. de Brito, Jorge A. Gonzalez e Hugo N. Nazareno

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - Universidade de Brasília - DF

**Palavras-chave:** localização dinâmica, caos

Foi estudado a propagação de portadores em super-redes unidimensionais, um modelo 'tight-binding' com um potencial de impureza em cada sítio que segue o seguinte mapa:

$$y_{n+1} = \mu y_n (1 - y_n), \quad e \quad \varepsilon_n = \varepsilon_0 y_n$$

O método utilizado foi a resolução exata de sistemas finitos crescentes, podendo identificá-los com redes infinitas.

A medida do caos foi feita através do expoente de Lyapunov em função de  $\mu$ ; determinando diferentes regimes de propagação para diferentes sistemas caóticos. O modelo aqui considerado está em uma classe intermediária entre quasi-periódica e completamente estocásticos.

Através da análise dos níveis energéticos em cada sítio, é possível prever o comportamento do sistema: quando haverá localização ou propagação, em uma forma esboçada.

Foi construído um diagrama de "transição de fase" no espaço de dois parâmetros ( $\mu, \varepsilon_0$ ). Caracterizando os diferentes regimes de propagação (ballístico, superdifusivo, difusivo, subdifusivo e localizado) pela bifurcação do diagrama. É observado assim a importância do grau de caoticidade para as propriedades físicas destes sistemas.

Aplicando um campo elétrico dc na rede, obteve-se que quanto maior a intensidade do campo, maior a localização, podendo haver casos de ressonância entre dois sítios.

## PROPAGAÇÃO DE DANOS NO FERROMAGNETO DE POTTS BIDIMENSIONAL COM CAMPOS EXTERNOS

Ladário da Silva<sup>1</sup>, Francisco Antonio Tamarit<sup>2</sup> e Aglaé Cristina Navarro de Magalhães<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF/CNPq )

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro, Brasil

<sup>2</sup>Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba  
Haya de la Torre y Medina Allende S/N, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina

*Palavras-Chave:* Transições de fase dinâmicas, ferromagneto de Potts, propagação de danos

Recentemente tem havido um crescente interesse no estudo de transições de fase e expoentes críticos dinâmicos. Uma das técnicas largamente empregada em tal estudo é a propagação de danos, que envolve a comparação da evolução temporal de duas ou mais cópias de um dado sistema sujeito ao mesmo ruído térmico.

Em nosso trabalho analisamos o comportamento dinâmico do ferromagneto de Potts com  $q=3$  estados com ou sem campo externo na rede quadrada. Utilizamos o método de propagação de danos onde as variáveis de spin são atualizadas sequencialmente segundo a dinâmica de "heat-bath". Obtivemos, em ausência do campo externo, três regimes onde a distância de Hamming para longos tempos apresenta comportamentos distintos, a saber: i) é nula para altas temperaturas ( $T \geq T_1$ ); ii) tem um limite não-nulo independente do dano inicial para temperaturas intermediárias (para  $T_2 \leq T < T_1$ ); iii) apresenta um limite que depende do dano inicial para baixas temperaturas ( $T \leq T_2$ ). Usando propriedades de escala de tamanhos finitos obtivemos estimativas para as temperaturas de transição  $T_1$  e  $T_2$ , bem como para os expoentes críticos dinâmicos  $z_1$  e  $z_2$  associados aos tempos de relaxação. Nossa estimativa para  $T_2$  é consistente com a igualdade  $T_2 = T_c$ , onde  $T_c$  é a temperatura crítica estática. Tal como ocorre no ferromagneto de Ising, verificamos que os parâmetros de ordem decaem, para tempos curtos, e nas temperaturas de transição  $T_1$  e  $T_2$ , com expoentes  $\delta$  que diferem do conhecido expoente  $\beta/\nu$  da magnetização. Observamos que a aplicação de um campo magnético uniforme não destrói nenhuma das duas transições, ao passo que a transição em  $T_1$  é aniquilada por um novo tipo de campo que desempenha o papel de um campo conjugado (similamente ao caso do modelo de Ising estudado anteriormente).

( CBPF/CNPq )

## PROPAGAÇÃO DE DANO NO MODELO DE HOPFIELD ULTRA-DILUÍDO

Crisógono Rodrigues da Silva<sup>1,2</sup>, Ladário da Silva<sup>2</sup> e Francisco Antonio Tamarit<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Alagoas, Dep. de Física, Campus A.C. Simões,  
Cidade Universitária, Tabuleiro do Martins, Maceió, Alagoas, Brasil

<sup>2</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro, Brasil

<sup>3</sup>Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba,  
Haya de la Torre y Medina Allende, S/N, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina

*Palavras-Chave:* Modelo de Hopfield, Ultra-diluição e propagação de dano

Neste trabalho, estudamos uma extensão do Modelo de Hopfield ultra-diluído que apresenta uma estrutura bastante complexa nos atratores de reconhecimento. Através de simulação numérica, usando a técnica de propagação de dano com uma dinâmica paralela, medimos a distância de Hamming ( $dh$ ) entre duas configurações que evoluem com a mesma sequência de números aleatórios. Apesar da aparente dificuldade na implementação de tais redes em um computador, devido a condição imposta à conectividade:  $C \ll \ln N$  e  $C \gg 1$  (ultra-diluição) sendo  $N$  o tamanho da rede e requerer neste limite um número muito grande de neurônios, trabalhos realizados com pequenos valores de  $C$  e grandes redes, porém finitas, tem sido bem sucedidos. Mostramos que para conectividades finitas o sistema apresenta três regimes distintos, a saber: um regime onde existe somente pontos fixos ( $dh = 0$ ) para  $\alpha < \alpha_2(C)$ , um regime intermediário onde existe uma mistura de ciclos de diferentes períodos e também caos para  $\alpha_2(C) < \alpha < \alpha_1$ , ( $dh \neq 0$  e cresce monotonamente) e por último um regime onde só existe caos ( $dh \neq 0$  e constante) para  $\alpha > \alpha_1$ . É interessante relatar que  $\alpha_1$  coincide numericamente com  $\alpha_c = 2/\pi$  e que o regime onde só existe pontos fixos tende a desaparecer quando aumentamos a conectividade ( $\alpha_2(C \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ ), o que foi previsto analiticamente por Derrida et al<sup>1</sup>. Recentemente foi proposto um campo conjugado capaz de quebrar a transição dinâmica presente, por exemplo, no autômato celular de Domany-Kinzel, modelo de Ising e Potts em duas dimensões. Aplicamos este campo no modelo de Hopfield ultra-diluído e calculamos numericamente a susceptibilidade de dano.

[1] Derrida B., Gardner E. and Zippelius A. *Europhys. Lett.*, 4 (1987) 167

(CBPF/CNPq)

## ESTIMATIVA DAS DIMENSÕES GENERALIZADAS $D_q$ E DO ESPECTRO DE SINGULARIDADES $f(\alpha)$ A PARTIR DE UM ALGORITMO DE CONTAGEM DE CAIXAS MÓVEIS.

N. N. Oiwa, N. Fiedler-Ferrara.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo CP 66318 - CEP 05389 970.

**Palavras-Chave:** fractal, dimensões generalizadas, espectro de singularidades.

Recentemente foram desenvolvidos diversos algoritmos para estudar a natureza fractal de inúmeros fenômenos físicos. Contudo, em geral eles não são representados por fractais simples, tal como o conjunto de Cantor. Eles apresentam dimensões generalizadas, como no caso do atrator de Feigenbaum. São conhecidos como multifractais e podem ser caracterizados utilizando-se as dimensões generalizadas de Renyi  $D_q$  e o espectro de singularidades  $f(\alpha)$ .

Entretanto, geralmente é difícil estimar  $D_q$  e  $f(\alpha)$  nos algoritmos baseados em métodos de contagem de caixa (Block *et al.*, A42, 1869 (1990)) porque eles são muito sensíveis à posição das caixas que cobrem o atrator (Yamaguti, dissertação de mestrado, USP (1992)). Estimamos  $D_q$  e  $f(\alpha)$  utilizando um novo algoritmo que contorna esse problema.

O método baseia-se no algoritmo proposto por Friedman *et al.* (ACM Trans. Math. Soft. 3, 209 (1977)). Nesse algoritmo o atrator é coberto por caixas de tamanhos diferentes. Nós o adaptamos para cobrir o atrator utilizando caixas com o mesmo comprimento. A rotina é recursiva e os dados estão estruturados segundo uma árvore binária. Nesse método as caixas que cobrem o atrator movem-se no espaço. Assim, otimiza-se o número de caixas. Calculam-se as dimensões generalizadas de Renyi  $D_q$  a partir do histograma da quantidade de pontos pelo número de caixas. A transformada de Legendre do par  $(q, D_q)$ , através de um ajuste quadrático no gráfico  $q \times (q - 1)D_q$ , nos dá o espectro de singularidades  $f(\alpha)$ .

Aplicamos o método ao conjunto de Cantor, atrator de Feigenbaum, mapa de Hénon e ao fluxo de Lorenz. As curvas  $D_q$  e  $f(\alpha)$  são estimadas nesses objetos fractais e os resultados são comparados com aqueles obtidos com o método de Block *et al.* e cálculos semi-analíticos. O método proposto mostrou-se mais preciso quando comparado com o algoritmo de Block *et al.* (CNPq)

## TRANSIÇÃO DE FASE EM AUTÔMATO CELULAR COM SIMETRIA "UP-DOWN"

Tânia Tomé e J. R. Drugowich de Felício

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Ribeirão Preto

**Palavras-Chave:** autômato celular, imunologia, fenômenos críticos irreversíveis

Recentemente introduzimos [1] um autômato celular probabilístico, definido numa rede quadrada, para descrever uma parte do sistema imunológico. O autômato evolui no tempo de acordo com dinâmica estocástica definida por regras locais que possuem simetria "up-down". Construímos dinâmica subjacente à dinâmica original, da qual obtivemos relevantes resultados. Um dos resultados importantes provenientes desse procedimento está relacionado com a formação de ordem nesse autômato. A dinâmica subjacente se identifica com o problema da percolação por sítios. A partir dessa identificação obtivemos resultados exatos para o modelo e também o limite inferior para o valor do parâmetro crítico, o qual está relacionado com a probabilidade de percolação crítica. Esses resultados são verificados tanto nas análises de campo médio dinâmico quanto nas simulações numéricas. Enfocamos também o problema relativo à determinação da classe de universalidade do modelo. Uma das abordagens para o estudo da universalidade em transições de fase cinéticas é a concernente a um formalismo, que se assemelha ao utilizado na análise de fenômenos críticos em equilíbrio, mas considerado em outro nível descritivo. Para certas categorias de modelos de rede definidos por dinâmicas irreversíveis, têm sido feitas conjecturas a respeito das classes de universalidade. Uma dessas é a conjectura "up-down" [2]. A análise que procedemos para esse autômato indica que o modelo pertence à classe do modelo de Ising em duas dimensões. Este resultado corrobora a conjectura "up-down".

[1] T. Tomé and J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Rev. E* (1996).

[2] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Yu He, *Phys. Rev. Lett.* 55, 2527 (1985).

## Kink catastrophes in the $\phi^4$ model with inhomogeneities and in the Sine-Gordon equation

Jorge Alberto González e Bernardo de Assunção Mello  
Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UNB

*Palavras-chave:* soliton, non-linearity, bifurcations

The dynamic of solitons in the presence of inhomogeneities is a field of great interest in recent year. This is because these non linear models can be applied to a wide class of problems in condensed matter physics. In most of known works the soliton is treated as a structureless point like particle. In the best case, they use the Collective Coordinate Approach (CCA), which can be extended in the  $\phi^4$  model to consider the known internal mode of the unperturbed equation. In the present letter we show the existence of important differences between the result of using such an approach and the real dynamics of solitons.

In the  $\phi^4$  model we investigate the stability conditions for the motion of a soliton in the presence of inhomogeneities, that can describe an external force or an impurity. Not only instabilities of the translational mode can appear, but also of internal modes and even of the phonon modes. These instabilities lead to surprising soliton explosions that were studied here for the first time. We show the existence of a much more rich dynamics due to the presence of a large number of excited internal modes. These internal modes can cause "qualitative" changes in the kink dynamics, leading to phenomena (like soliton explosions) unthinkable in the usual approach. If the system in addition is perturbed by a time dependent force we can observe a series of complex phenomena like nonlinear resonance, frequency jumps, hysteresis, chaos, etc.

In the Sine-Gordon equation we study how two "quarks" are annihilated to create a kink. Also we investigate the behavior of "tachions," which can move with velocity greater than 1.

## MODOS LOCALIZADOS INTRÍNSECOS FORÇADOS EM UMA CADEIA ANARMÔNICA

Nikolai Pavlovitch Tretiakov, José Nicodemos Teixeira Rabelo  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

*Palavras-Chave:* 1) Dinâmica de rede; 2) anarmonicidade; 3) modos localizados

Entre as várias formas de vibrações nos cristais, recentemente foi descoberto teoricamente e tem sido estudado intensivamente um novo tipo de modos vibracionais, que são fortemente localizados no espaço com valores de frequência fora das bandas fonônicas e que podem surgir em qualquer lugar da rede. Até recentemente porém este estudo se limitava à dinâmica de redes na ausência de forças externas. Entretanto, para a verificação experimental destes modos é importante investigar sua interação com agentes externos, como o laser por exemplo. No presente trabalho mostramos que redes periódicas unidimensionais com interação anarmônica de quarta ordem podem exibir uma resposta altamente localizada quando submetida à ação de uma força harmônica externa localizada numa pequena região da cadeia. Até recentemente este problema só vinha sendo abordado no caso de uma força externa não localizada (T. Rossler, J.B. Page, 1995). Resolvemos as equações de movimento dos átomos da cadeia com interação entre primeiros vizinhos usando a aproximação RWA (Rotating Wave

Approximation). O potencial usado é  $\Phi = \frac{1}{2}K_2 \sum (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{4}K_4 \sum (u_{n+1} - u_n)^4$  (potencial "K<sub>2</sub>-

K<sub>4</sub>"), onde  $u_n$  são os deslocamentos atômicos dos sítios da rede. A força harmônica externa é aplicada sobre um ou dois átomos, sendo que no segundo caso os dois átomos vibram com fases opostas. Investigamos a existência de soluções ressonantes, em que todos os átomos vibram com a frequência da força externa. Esta frequência é obtida de forma autoconsistente a partir da solução das equações de movimento. Para um dado grau de anarmonicidade ( $\lambda \sim K_4/K_2$ ), o aumento da amplitude da força externa provoca o crescimento da frequência das vibrações e o aumento das amplitudes, mantendo a simetria e o grau aproximado de localização do modo intrínseco. O efeito conjunto da anarmonicidade e da intensidade da força externa conduz a um aumento considerável do grau de localização.

## MODELOS ESTOCÁSTICOS DE REDE PARA PROPAGAÇÃO DE EPIDEMIAS

*Neli R. S. Ortega e Tânia Tomé*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo

*Palavras-Chave:* mecânica estatística de não-equilíbrio, propagação de epidemias, modelos estocásticos de rede

Uma das abordagens da mecânica estatística de não-equilíbrio é a concernente à construção de dinâmicas estocásticas definidas em reticulados. Nesse enfoque os fenômenos macroscópicos irreversíveis são tratados a partir de uma descrição que contenha em si a irreversibilidade. Dentro desse contexto vários autômatos e modelos estocásticos de gás de rede têm sido construídos com o objetivo de estudar transições de fase cinéticas em sistemas da física, biologia e química. Particularmente enfocamos o problema, inserido dentro de estudos de dinâmica de populações, da propagação de epidemias. O processo de contato, introduzido em 1974, parece ser um dos modelos de rede mais simples que descrevem a propagação de uma epidemia. Tal modelo, microscopicamente irreversível, apresenta transição de fase mesmo em uma dimensão. A transição ocorre para uma taxa crítica de infecção  $\lambda_c$ . Para  $\lambda < \lambda_c$  a fase estável no modelo é uma fase absorvente que corresponde a todos os indivíduos da população estarem sãos. Para  $\lambda > \lambda_c$  o estado ativo é estável e corresponde a uma população onde parte dos indivíduos está infectada. Através de formalismo de operadores obtém-se expansões em séries temporais [1] para o modelo e verifica-se que ele pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. Apresentamos cálculos relativos à estimativa da taxa crítica de infecção para o processo de contato definido numa rede de coordenação  $z$ . Também apresentamos análises que efetuamos para modelos correlatos a esse mas que descrevem epidemias genéricas.

[1] R. Dickman, *J. Stat. Phys.* 55, 997 (1989).

(FAPESP)

## NORMAL MODE OF VORTICES IN EASY-PLANE ANTIFERROMAGNETS: EXACT RESULTS AND BORN APPROXIMATION

*F. O. Coelho & A.R. Pereira & A. S. T. Pires*  
Departamento de Física - ICEX - UFMG

*Palavras Chave:* Antiferromagnets, Vortices, Normal Modes

A large variety of layered magnetic insulators has been shown to exhibit the experimental characteristic of two-dimensional (2D) magnetism and has been useful in testing theories pertinent to 2D systems. In classical models for these quasi-two-dimensional magnetic materials it has been found that nonlinear excitations (solitons, vortices) play an important role in the static thermodynamic properties, and are expected to be important in the spin dynamics. For example, mobile solitons and vortices were considered by some authors with the results that motion gives rise to a central peak in the frequency-dependent correlation function. However, other mechanism that can affect the dynamic is the soliton-magnon interaction. Our purpose in this work is to study the vortex-magnon interaction in 2D easy-plane antiferromagnets. Since the lowest order effect of an inhomogeneous vortex is to produce an elastic center for the magnons, we calculate the asymptotic phase-shifted cylindrical spin waves. We find (besides the continuous state) a bound state that can be detected in resonance or inelastic neutron scattering experiments. Next, the Born approximation is used to calculate the phase-shift of magnons and then compared with the exact results. We conclude that the Born approximation works very well for large angular momentum channels but may fail for s- and p-waves.

(CNPQ)

## SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS PARA MEDIDA DE PERÍODOS SUCESSIVOS BASEADO EM UM IBM-PC.

*Reynaldo Daniel Pinto*

*José Carlos Sartorelli*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* contador, temporizador, interface

Apresentamos neste trabalho uma opção de baixo custo de um sistema de aquisição de dados para a medida de períodos sucessivos de um sinal digital. Para melhor estabilidade de temporização, optamos por construir um gerador de *clock* a cristal de 8 MHz e um divisor de frequências que fornece um sinal de 1 MHz para alimentar um contador de 32 bits, ficando desta maneira independente do *clock* da CPU utilizada para a aquisição. Com esta configuração, podemos medir períodos desde 1  $\mu$ s até 71 min com uma resolução de 1  $\mu$ s. Após o final de um período, a contagem é armazenada em um *latch* de 32 bits onde fica aguardando a leitura pela CPU, o contador é reinicializado e, portanto, o tempo de espera pelo atendimento da CPU não altera as contagens desde que seja menor que o período medido. O sinal de entrada é amostrado por um circuito de controle que gerencia o funcionamento do contador e do *latch*. Desenvolvemos também uma interface para conectar o circuito a um IBM-PC compatível. O número máximo de dados adquiridos depende apenas da capacidade de memória do microcomputador e do *software* utilizados. O circuito de controle foi desenvolvido de modo a utilizarmos o contador na aquisição de dados da experiência da torneira gotejante [1], mas é fácil adaptá-lo à outras finalidades. No projeto do circuito foram utilizados circuitos integrados TTL [2] de baixo custo e fácil aquisição. A montagem do protótipo está sendo feita em uma placa padrão para IBM-PC compatível utilizando a técnica de *wire-wrap*. (CNPq e Fapesp)

1. Sartorelli, J.C., Gonçalves, W. M., Pinto, R.D., Phys. Rev., E49, 3963 (1994);
2. The TTL Data Book for Design Engineers, second edition, Texas Instrument Inc. (1976).

## CONSTRUÇÃO DE INVARIANTES DE SISTEMAS HAMILTONEANOS PELO TEOREMA DE LIOUVILLE

*Zolacir Trindade de Oliveira Junior*

Instituto de Física - UNICAMP

*Palavras chave:* Sistemas Hamiltonianos, Teorema de Liouville, Invariantes

Neste trabalho, apresentamos um método para obter invariantes de sistemas hamiltonianos autônomos com 2 graus de liberdade. Utilizamos a condição de involução do teorema de Liouville, associada ao fato de impormos que a forma funcional destes invariantes  $I$  seja a de um polinômio de grau 'm' nas suas variáveis, os momenta  $\{ \text{onde } I=I(p_1, p_2) \}$ . Enquanto que os coeficientes de tal polinômio são funções no mínimo de classe  $C^2$  nas coordenadas  $q_1$  e  $q_2$ . Seguindo tal procedimento, obtemos a equação fundamental do método, que é uma equação indiacial nos coeficientes e nas variáveis, envolvendo derivadas parciais dos coeficientes e do potencial. Mostramos que, para a família de potenciais cuja a forma funcional é a de um polinômio de coeficientes constantes das coordenadas  $q_1$  e  $q_2$ , a equação fundamental do método é transformada em um Sistema Super- Determinado de Equações Algébricas Lineares (SSDEAL). Com o objetivo de resolver o SSDEAL, construímos um algoritmo, que efetua operações elementares sobre os elementos de matriz da matriz dos coeficientes do SSDEAL. Este é um algoritmo que vai gerando, por um processo exaustivo, todas as possíveis soluções do SSDEAL. O procedimento seguido neste algoritmo nos permite trabalhar tanto com um potencial particular, quanto com uma família de potenciais, caracterizada pela sua forma funcional e pelos seus parâmetros livres. No último caso, o algoritmo dá, como consequência da solução do SSDEAL, o invariante relativo a um dado potencial obtido da família por uma dada relação algébrica entre os seus parâmetros livres. Como aplicação do método em questão, utilizamos polinômios de ordem 2 nos momenta para o invariante e de ordem 4 nas coordenadas para o potencial. E os resultados obtidos com o método fornecem, entre vários outros, casos integráveis do potencial tipo Hénon-Heiles e de potenciais quárticos.

## SIMETRIAS DE LIE TRANSCENDENTAIS E O SISTEMA DE LOTKA-VOLTERRA

*M. A. Almeida, I. C. Moreira*  
Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro  
*Oswaldo de M. Ritter*  
Depto. de Física da Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-chave:* Integrabilidade; simetrias de Lie; integrais primeiras; caos.

O uso das simetrias de sistemas dinâmicos tem sido um dos métodos utilizados para investigação de sistemas não-lineares. Se a dimensão do espaço de fases é maior do que dois, a ampla maioria destes sistemas têm domínios no espaço de fases onde o movimento apresenta caos. Um problema matemático e físico importante é achar condições para a ausência deste comportamento caótico procurando valores de parâmetros para os quais o sistema dinâmico pode ser completa ou parcialmente integrado. A noção de integrabilidade está relacionada à existência de integrais primeiras. Assim, o conhecimento das simetrias de um sistema é bastante importante do ponto de vista físico. Neste trabalho utilizamos o método de Lie de obtenção das simetrias de um sistema de equações diferenciais. A implementação prática deste método depende da suposição de uma forma polinomial para os campos vetoriais de simetria. Este tipo de restrição conduz, no caso geral, somente à integrais primeiras polinomiais. No trabalho mostramos que o método de Lie pode ser usado também para a obtenção de expressões racionais e transcendentais para as transformações de simetria. Para demonstrar isto utilizamos o sistema de Lotka-Volterra bi e tridimensional como exemplos. Em ambos os casos mostramos que a determinação de transformações de simetrias de Lie racionais ou transcendentais pode ser útil na identificação de integrais primeiras não polinomiais de equações diferenciais. Para o sistema de Lotka-Volterra bidimensional analisamos uma integral primeira deste tipo. Para o caso tridimensional analisamos quatro diferentes casos de valores dos parâmetros das equações diferenciais. Em todos eles obtemos integrais primeiras.

## MÉTODO DA EQUAÇÃO INTEGRAL APLICADO EM BILHARES QUÂNTICOS

*Murilo Louzeiro Tiago*  
*Marcus Aloizio Martinez de Aguiar*  
*Túlio Oliveira de Carvalho*  
Departamento de Física do Estado Sólido, Instituto de Física, UNICAMP - SP

*Palavras-Chave:* caos quântico, bilhares, integração de fronteira

Uma classe importante de sistemas dinâmicos com comportamento caótico, no sentido clássico, são os bilhares. Os bilhares mais simples são sistemas mecânicos bidimensionais fechados, onde uma partícula move-se livremente, colidindo elasticamente com a fronteira. Casos simples como o bilhar circular são integráveis. Por outro lado, o Bilhar de Sinai e o Estádio de Bunimovich são caracteristicamente caóticos. Do ponto de vista quântico, sistemas assim podem ter dinâmica arbitrariamente complexa, mas existem métodos numéricos de solução da equação de Schrödinger com condições de contorno apropriadas. Dentre eles existe um método integral, baseado na função de Green da equação dinâmica, eficiente dada a rápida convergência e simplicidade numérica. Uma modificação possível no sistema é adicionar um campo magnético uniforme e perpendicular ao plano do bilhar. Com uma pequena alteração na estrutura do método, pudemos aplicá-lo para bilhares com campo magnético de fronteiras variadas, obtendo níveis e autofunções de energia. Com vistas a estudar os efeitos do campo magnético sobre a dinâmica quântica, utilizamos o método integral em um bilhar de fronteira elíptica, com excentricidade variável. O sistema proposto é um modelo simplificado de poços quânticos em campo magnético. Os resultados obtidos concordam bastante bem com os obtidos por outros métodos como a discretização da fronteira. Além disso, observamos efeitos de degenerescência e quase degenerescência de níveis usando o campo magnético como parâmetro. A densidade de níveis também foi computada. Em regime de campo baixo, os resultados concordam com aqueles conhecidos na literatura. Aumentando significativamente o campo, podemos observar o agrupamento dos níveis em regiões igualmente espaçadas: os níveis de Landau. Verificada a eficiência do método em um caso não-trivial como o bilhar elíptico, é natural aplicá-lo para estudar fenômenos mais complexos como o efeito Hall quântico.

## DINÂMICA CLÁSSICA DE BILHARES EM UM CAMPO MAGNÉTICO

Luis Gregório G. V. Dias da Silva e Marcus A. M. de Aguiar (Orientador)  
DFESCM- Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP - SP

*Palavras-Chave:* caos - bilhares - aprisionamento de elétrons

O estudo de sistemas caóticos conservativos ganhou novas perspectivas com o avanço de técnicas experimentais de litografia em hetero-estruturas quando tornou-se possível observar a dinâmica de elétrons confinados em potenciais integráveis e caóticos. Esses potenciais podem muitas vezes ser modelados teoricamente por poços de potencial infinito, ou bilhares, onde uma ou mais partículas movem-se livremente em uma superfície plana e limitada, sofrendo reflexões especulares ao atingir a fronteira, exatamente como em uma mesa de bilhar ideal. O movimento apresentará comportamento caótico ou integrável dependendo da geometria da fronteira e de efeitos perturbativos como a introdução de um campo magnético agindo sobre a partícula. O trabalho concentra atenção no estudo de dois tipos de bilhares: o Bilhar de fronteira quadrada, integrável para campo externo nulo, e o Bilhar de Sinay, que corresponde a um bilhar quadrado com um círculo rígido no centro, sendo caótico mesmo para campo nulo. Foram construídos simuladores numéricos para cada um dos sistemas e a dinâmica destes é descrita através de Mapas de Seção utilizando as Coordenadas canônicas de Birkhoff. Em tais mapas, existe a preservação de área tal qual que em uma seção de Poincaré usual. A análise dos resultados do Bilhar Quadrado mostrou a destruição dos toros racionais e a preservação dos irracionais (para campo perturbativo), conforme prevê o teorema KAM. No caso do Bilhar de Sinay, a introdução do campo perturbativo não alterou suas características ergódicas. Foi também confirmada a tendência do aparecimento de *órbitas aprisionadoras* para campos intermediários, órbitas que não são mapeadas explicitamente, mas que estão intimamente ligadas à aparição de picos na seção de choque de espalhamento de elétrons em cavidades do tipo Bilhar de Sinay.

(FAPESP)

## SOLUÇÕES ANALÍTICAS DA EQUAÇÃO NÃO LINEAR DE SCHRÖDINGER NA PRESENÇA DE UM TERMO DE AMORTECIMENTO LINEAR

Carlos A.L.Ribeiro, Jairo R. de Oliveira e Marco A. de Moura  
Departamento de física-Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-Chave:* dinâmica não linear, soliton

As equações de ondas não lineares, em particular a equação não linear de Schrödinger (ENLS) tem sido usada em muitas teorias. Essas equações possuem soluções especiais com caráter de partícula, que se propagam sem a modificação de forma, usualmente chamado de soliton ou kink. São largamente empregados em física do estado sólido, de partículas, de plasma, sendo também de grande interesse em física matemática. Como sabemos, a perda usualmente deteriora a intensidade do soliton provocando o seu alargamento. Neste trabalho estudamos o efeito da perda na forma do perfil desse soliton. Em trabalhos anteriores, o efeito da perda linear foi tratado através de métodos numéricos e perturbativos, onde o parâmetro da perda é pequeno. Conclusões ambíguas anteriores nos levaram à procura de soluções analíticas. O método utilizado foi desenvolvido recentemente no estudo das ondas de choque da ENLS (de Oliveira e de Moura, Phys.Rev.E, 1996, submetido), esse método consiste em fazermos um Ansatz no gradiente da fase do soliton, onde supomos sua dependência com a intensidade do próprio soliton. Tal Ansatz nos permite desacoplar as equações que resultam da ENLS quando separamos suas partes, real e imaginária. Esse procedimento permite encontrar soluções analíticas para a amplitude e fase do soliton, na presença da perda linear. Essas soluções dependem dos dois parâmetros introduzidos pelo Ansatz. A determinação desses parâmetros depende da natureza das soluções encontradas as quais levam à restrições nos valores dos mesmos. Uma conclusão importante que tiramos é o fato de que a perda apenas atenua a intensidade do soliton, esse resultado está em contradição com o previsto por Blow e Doran, perturbativamente (Opt. Comm. 52, 367, 1985), onde a inclusão da perda provoca somente uma compressão na largura do soliton sem afetar a sua intensidade.

(CNPq)

## O OSCILADOR DE DUFFING NUMA ÓPTICA MECANO-ESTATÍSTICA

*Marcelo de Souza Lima Fattore e Mário Alberto Tenen*

Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

*Palavras-Chave:* sistemas dinâmicos, caos, mecânica estatística

O oscilador de Duffing (oscilador submetido a um potencial anarmônico com um termo quadrático e outro quártico) serve de modelo para se estudarem alguns tipos de sistemas físicos tais como circuitos elétricos e sistemas mecânicos. Esse oscilador também pode servir de modelo para o estudo, por exemplo, do comportamento de excitações elementares em sólidos, em cujo caso é necessário um tratamento mecano-estatístico. Neste trabalho, propõe-se estudar pela óptica da mecânica estatística de não equilíbrio o problema do oscilador de Duffing forçado. Num arcabouço clássico, considera-se uma hamiltoniana modelo que representa um oscilador anarmônico em interação com um banho de osciladores harmônicos e submetido ainda a uma força externa harmônica (como seria o caso de uma carga num campo elétrico oscilante, na aproximação de dipólo elétrico). Graças à forma da interação entre o oscilador anarmônico e os osciladores do banho, é possível resolver parcialmente as equações dinâmicas, obtendo-se para o oscilador uma equação de "Langevin" não linear exata. A seguir, considerando-se médias num *ensemble* estatístico, é possível deduzir, num contexto mecano-estatístico, uma equação de movimento para o oscilador forçado que leva em conta a não linearidade do potencial: a equação de Duffing. Finalmente, apresentam-se alguns aspectos dinâmicos do comportamento do oscilador (quebra de simetria, bifurcações, rota para o caos).

(FAPESP, CNPq)

## CÁLCULOS DE COMPLEXIDADE NA EXPERIÊNCIA DA TORNEIRA GOTEJANTE

*Whilk Marcelino Gonçalves*

*José Carlos Sartorelli*

Departamento de Física Geral, Instituto de Física, USP.

*Palavras-Chave:* dinâmica simbólica, caos determinístico, complexidade

Apresentamos resultados de cálculos de complexidade algorítmica, gramatical e de conjunto aplicados à experiência da torneira gotejante [1,2,3], a qual apresenta uma grande diversidade de comportamentos tais como crises, intermitências e duplicações de período. Utilizando-se técnicas de dinâmica simbólica [4], são realizadas partições sobre mapas de primeiro retorno tridimensionais construídos com os tempos de passagem de gotas sucessivas. Através de compressões das seqüências simbólicas geradas pela visitação das órbitas às partições numeradas, determinamos as sub-cadeias simbólicas (palavras) mais frequentes e suas respectivas probabilidades. Dessa forma podemos quantificar os tempos relativos de permanência do sistema em diversos regimes intermitentes. A partir desses resultados, o sistema dinâmico pode ser representado através de grafos dirigidos finitos [5], ou autômatas mínimos, cujo número de nós e respectivas probabilidades associadas aos diversos laços permite-nos calcular a complexidade algorítmica e a de conjunto [6] associadas à dinâmica. Com a classificação das palavras geradas em estruturas de árvore estimamos também a sua complexidade gramatical (CNPq, Fapesp).

[1] P. Martien, S. C. Pope, P. L. Scott, and R. S. Shaw, *Phys. Rev. Let.* **110A**, 339 (1985).

[2] J. C. Sartorelli, W. M. Gonçalves, and R. D. Pinto, *Phys. Rev. E*, **49**, 3963 (1994).

[3] R. D. Pinto, W. M. Gonçalves, J. C. Sartorelli, and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E*, **52**, 6892 (1995).

[4] N. Metropolis, M. L. Stein, P. R. Stein, *J. Comb. Theor.*, **A15**, 25 (1973).

[5] P. Grassberger, *Int. J. Theor. Phys.*, **25**, 907 (1986).

[6] S. Wolfram, *Commun. Math. Phys.*, **96**, 15 (1984).

## CADEIA LINEAR ALTERNADA COM SPINS 1 E 3/2 COM TERMOS DE ANISOTROPIA DO ÍON SIMPLES E BIQUADRÁTICO.

E. C. Fireman e R. J. V. dos Santos  
Departamento de Física, UFAL

*Palavras-Chave:* decoração, cadeia linear, anisotropia..

Estudamos uma cadeia linear alternada com spins 1 e 3/2. Nosso objetivo é obter as propriedades termodinâmicas como: energia interna, calor específico, etc. Utilizamos a transformação de decoração para spins 1, semelhante a apresentada por Syozi para spins 1/2. É considerado o spin 3/2 como spin decorador. Este trabalho é uma aplicação da transformação de decoração para spins 1 recentemente desenvolvida por um dos autores. Com a transformação reduzimos os graus de liberdades do sistema, passando para um sistema efetivo com termos efetivos de: anisotropia do íon simples, biquadrático, campo efetivo, mistos e um termo independente. No total podemos ter nove parâmetros efetivos a depender de cada modelo. Para a nossa cadeia a transformação se reduz a um modelo semelhante ao de Blume - Emery - Griffiths ( Modelo de BEG ). O modelo é resolvido exatamente pela técnica da matriz de transferência. Para calcularmos a energia livre de Helmholtz, a energia interna, e o calor específico foram utilizadas as relações termodinâmicas convencionais. A susceptibilidade magnética foi calculada utilizando teoria de perturbação, ou seja, separamos a matriz de transferência em duas partes: uma matriz par e uma outra ímpar. A parte ímpar foi considerada uma perturbação, pois nos interessa o limite quando H tende a zero. Também foram feitos estudos do estado fundamental para os parâmetros de anisotropia do íon simples nos spins 1 e 3/2,  $d$  e  $d'$  respectivamente, e o termo biquadrático  $\gamma$ . São feitos os seguintes cortes no espaço tridimensional de parâmetros:  $(d \times d')$ ,  $(d \times \gamma)$ ,  $(\gamma \times d')$ . Mostramos que o modelo pode apresentar 3 ou 4 fases a depender da região do espaço de parâmetros.

( CNPq, CAPES, FINEP )

## FUNÇÕES DE GREEN EM REDES DE ANDERSON USANDO OPERADORES DE HUBBARD DO TIPO BOSE

Carlos Corrêa Junior e Mario E. Foglio

Instituto de Física Gleb "Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, SP

*Palavras-Chave:* rede de Anderson, operadores de Hubbard, expansão em cumulantes

A rede de Anderson está estreitamente relacionada à valência intermediária, aos sistemas Kondo e aos férmions pesados, cuja característica essencial é a existência de elétrons localizados com uma forte correlação devida à repulsão coulombiana. Estes fenômenos aparecem nas terras raras, actínídeos e metais de transição.

A rede de Anderson com  $U \rightarrow \infty$  tem sido estudada pela expansão diagramática em cumulantes usando a hibridização como perturbação (M. S. Figueira, M. E. Foglio e G. G. Martinez, Phys. Rev. B 50, 17933 (1994) ). Nesse trabalho se usaram funções de Green com operadores do tipo de Fermi, que criam ou destroem um elétron. Em particular, tem sido calculados  $n_0$  e  $n_\sigma$ , que são os números de ocupação dos estados sem elétron  $f$  e com um elétron  $f$  de spin  $\sigma$  respectivamente.

No presente trabalho, estendemos o método acima citado ao caso de funções de Green de operadores do tipo de Bose que não mudam o número de elétrons, o que permitiria calcular diretamente as susceptibilidades magnéticas da rede de Anderson. Apresentamos as contribuições dos dois tipos de diagramas mais simples possíveis às funções de Green do tipo de Matsubara  $\langle\langle X_{j,00}(\tau) X_{j,00} \rangle\rangle_+$ ,  $\langle\langle X_{j,\sigma\sigma}(\tau) X_{j,\sigma\sigma} \rangle\rangle_+$  e  $\langle\langle X_{j,\bar{\sigma}\sigma}(\tau) X_{j,\sigma\bar{\sigma}} \rangle\rangle_+$ , onde  $X_{j,a,b}$  é o operador de Hubbard que transforma o estado localizado  $|j,b\rangle$  no estado  $|j,a\rangle$ , sendo o ordenamento cronológico com respeito ao tempo imaginário  $\tau$ . Com estas funções de Green calculamos valores numéricos para os números de ocupação dos elétrons localizados, que são um primeiro passo para a obtenção das susceptibilidades.

(FAPESP, CNPq, FAEP-Unicamp)

## EXPANSÃO EM CUMULANTES PARA O MODELO DE HUBBARD

*Flavio S. Nogueira*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF-RJ - Brasil

*Marcos S. Figueira*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ - Brasil

*Enrique V. Anda*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ - Brasil

*Palavras-Chave:* modelo de Hubbard, expansão em cumulantes, transição metal-isolante

O Hamiltoniano de Hubbard, extensamente usado para descrever sistemas fortemente correlacionados, é estudado através de uma expansão perturbativa em cumulantes, para a função de Green (FG), em torno do limite atômico (W. Metzner, Phys. Rev. B 43, 8549 (1991)). Nesta expansão a integral de transferência de elétrons, entre diferentes sítios atômicos, é tomada como Hamiltoniano de perturbação do sistema. A expansão só envolve diagramas conectados com somas irrestritas sobre a rede, o que permite formular um teorema do tipo "linked cluster".

As aproximações propostas incluem cumulantes de até quatro operadores com e sem termo de "spin-flip", vestindo autoconsistentemente os propagadores e que combina de todas as formas possíveis os diagramas de cadeias e anéis simples de qualquer tamanho ((M. S. Figueira, G. G. Martinez e M.E. Foglio, Phys. Rev. B 50, 17933 (1994)). Embora a aproximação satisfaça as relações de completude nos números de ocupação, a introdução dos termos de "spin-flip" criam não-analiticidades no plano complexo, entretanto esse problema é resolvido aplicando os mesmos métodos utilizados nas simulações de Monte-Carlo (J. Skilling e R. K. Brian, Mon. Not. R. Astr. Soc. 211, 111 (1984)).

São apresentados resultados para a densidade de estados em função da energia de correlação  $U$  e dos números de ocupação. As propriedades da transição metal-isolante são estudadas para uma ocupação de um elétron por átomo. como é comum nas aproximações onde a solução atômica é tomada como ponto de partida, o sistema é descrito como não sendo um líquido de Fermi.

(CNPq, Fundação Vitae)

## RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA EM SISTEMAS SUPERPARAMAGNÉTICOS

*Trieste F. Ricci e Claudio Scherer*

Instituto de Física

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*Palavras-Chave:* ressonância estocástica, superparamagnetismo, fluidos magnéticos.

O fenômeno da ressonância estocástica tem recentemente despertado o interesse tanto de pesquisadores teóricos como de experimentais. Trata-se de fenômeno pelo qual a influência do ruído sobre a resposta do sistema a um sinal determinístico é um aumento na intensidade da ressonância. Trabalhos teóricos sobre sistemas superparamagnéticos, baseados no modelo de Brown, não têm conseguido prever o fenômeno de ressonância estocástica. Um modelo alternativo, desenvolvido por nós [1], que permite flutuação não só na orientação mas também na amplitude dos momentos magnéticos das partículas, é usado no presente trabalho. Como ferramenta teórica para calcular a susceptibilidade magnética é usada uma formulação recente de teoria da resposta linear para sistemas estocásticos marcofianos [2]. A ressonância do sistema com campos magnéticos oscilantes é caracterizada por picos na parte imaginária da susceptibilidade. No limite de ruído nulo nosso modelo pode ser resolvido exatamente, resultando na susceptibilidade conhecida para paramagnetos normais. Na presença de ruído e para convenientes valores dos parâmetros, os picos de ressonância aparecem consideravelmente aumentados e levemente deslocados de suas posições sem ruído. As flutuações na amplitude dos momentos magnéticos, em nosso modelo, são monitoradas por um parâmetro, reproduzindo o modelo de Brown num limite conveniente do mesmo. Neste limite, como esperado, não se observa o fenômeno de ressonância estocástica. (FAPERGS)

[1] T.F.Ricci e C.Scherer, J.Stat.Phys. 67, 1201 (1992).

[2] T.F.Ricci e C.Scherer, XVIII ENFMC, pg 102. Recentemente submetido a J.Stat. Phys.

## METAL-INSULATOR TRANSITION IN PRESENCE OF EXCITONIC CORRELATION

Mucio A. Continentino<sup>1</sup>, Gloria M. Japiassú<sup>2</sup> and Amós Troper<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (UFF)  
Campus da Praia Vermelha, Niterói, 24210-340, RJ, Brazil

<sup>2</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)  
Caixa Postal 68528, Rio de Janeiro, 21945-970, RJ, Brazil

<sup>3</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)  
Rua Xavier Sigaud 150, Rio de Janeiro, 22290-180, RJ, Brazil

**Key words:** excitons, metal-insulator transition, hybridization

We study the possibility of an excitonic transition in a two-band model and show that a true phase transition does not occur in the presence of hybridization since the one-body mixing term acts as a conjugate field to the order parameter of the excitonic phase. We obtain that the effective mixing term is strongly renormalized by excitonic correlations<sup>1</sup> and suggest an alternative interpretation for recent experiments on rare earth semiconductors<sup>2</sup> based on a metal-insulator transition associated with the opening or closing of a hybridization gap at a critical pressure. A characteristic feature of this metal-nonmetal transition is that the gap varies linearly with the pressure close to the critical pressure. This is a direct consequence of the fact that the gap exponent assumes the value  $\nu = 1$ . Comparison with available experimental data are presented.

<sup>1</sup> P. Wachter, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth, vol.19 - Lanthanides/Actinides: Physics - II edited by K.A. Gschneider, Jr., Eyring, G.H. Lander and G.R. Choppin, 1994, Elsevier Science B.V..

<sup>2</sup> M.A. Continentino, G.M. Japiassú, and A. Troper, J. of Phys.: Condensed Matter 7, L701 (1995).

## TRANSIÇÃO KOSTERLITZ-THOULESS EM CADEIAS QUÂNTICAS ANTIFERROMAGNÉTICAS DE HEISENBERG

J. P. Neirotti e M. J. de Oliveira

Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

**Palavras-Chave:** antiferromagnetos, sistemas de Haldane, sistemas de Heisenberg

Modelos quânticos unidimensionais têm sido até hoje instrumentos importantes para a compreensão das propriedades magnéticas da matéria. O modelo de Heisenberg unidimensional se destaca pela grande variedade de fenômenos complexos que pode descrever. Para o caso de spins 1/2, Bethe achou as propriedades do estado fundamental e excitações elementares. Em particular, achou que para o antiferromagneto isotrópico entre o nível fundamental e o primeiro excitado não há gap.

Haldane [1], conseguiu mapear o modelo na aproximação semiclássica de spins grandes no modelo sigma não linear. A Lagrangeana efetiva por ele obtida apresenta um termo extra para o caso em que os spins do sistema são semi inteiros. O efeito produzido por este termo é a presença de um gap de energia no sistema com spins inteiros. Resultados numéricos [2], e experimentais [3], dão suporte a esta conjectura.

Se se introduz um parâmetro de anisotropia  $A$  na Hamiltoniana e se estudam as propriedades fundamentais do sistema em função deste parâmetro, se vê que a fase massiva se estende por debaixo do valor  $A = 1$  (ponto isotrópico) até um valor próximo de  $A_c \geq 0$ . Na atualidade existe uma conjectura [4] a qual assegura que  $A_c = 0$ .

Fazendo uso do método de renormalização por matriz densidade [5], e usando a teoria de finite-size scaling, se estudou a transição no ponto  $A_c$  entre as fases massiva e não massiva.

[1] F. D. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983)

[2] J. P. Neirotti and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **53**, 668 (1995)

[3] N. Fujiwara, et. al., *Phys. Rev. B* **47**, 11860 (1993)

[4] F. C. Alcaraz and A. Morco, *Phys. Rev. B* **46**, 2896 (1992)

[5] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993)

(CAPES)

## PROPRIEDADES LOCAIS AO REDOR DE UMA IMPUREZA DE Fe EM Cd HCP

*Pablo Guillermo Gonzales Ormeño - Helena Maria Petrilli*  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*palavras-chave: estrutura eletrônica, iterações hiperfinas*

O problema do momento localizado é um problema antigo que recebeu nova atenção nos últimos tempos devido ao significativo avanço das técnicas experimentais que permitem tanto a confecção de sistemas que usualmente não formam ligas como análise muito precisa de propriedades magnéticas num dado sítio via interações hiperfinas. Entretanto, o comportamento magnético de alguns sistemas, como impurezas de Fe em hospedeiros Cd e Zn, ainda são controversos. Por outro lado, cálculos teóricos de estrutura eletrônica têm se apresentado nos últimos tempos como uma importante ferramenta capaz de descrever o comportamento magnético de impurezas metais de transição em hospedeiros metais de transição. Entretanto a boa descrição destes sistemas dentro da aproximação local da teoria do funcional da densidade (LSDA) é um constante desafio.

Neste trabalho utilizamos o método RS- LMTO-ASA ( Real Space- Linear Muffin Tin Orbital-Atomic Sphere Approximation ), que é um método de primeiros princípios dentro da LSDA, para estudar o comportamento magnético de impurezas de Fe em Cd e Zn com estrutura hcp. Este trabalho é a continuação da análise sistemática que temos feito sobre as condições que favorecem ou não o aparecimento do momento localizado. Através do RS-LMTO-ASA obtemos densidades locais de estados, momento magnético local e propriedades hiperfinas tais como deslocamento isomérico, gradiente de campo elétrico no núcleo e campos hiperfinos de contato nos sítios da impureza e seus vizinhos. Comparamos nossos resultados para as interações hiperfinas com resultados experimentais recentes obtidos através de Espectroscopia Mössbauer e Distribuição Angular Perturbada Tempo Diferencial. Correlacionamos as propriedades magnéticas com características das densidades de estado locais.

( CNPq - FAPESP )

## Um método alternativo para a solução do Problema de Kondo

*Amir O. Caldeira e Bernardo de Assunção Mello*  
Departamento de Estado Sólido  
Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

*Palavras-chave: impurezas magnéticas, rede de Anderson*

Férmions pesados são compostos metálicos que contém átomos de terras raras e que podem ser modelados por um metal em uma rede de impurezas magnéticas, a rede de Anderson. Em determinadas condições (limite Kondo), este modelo reduz-se a uma rede de impurezas tipo Kondo, o que sugere que o problema de impurezas de Kondo simples pode contribuir para a solução do problema. Durante muitos anos o problema de Kondo permaneceu sem uma solução exata, atualmente encontrada usando-se grupo de renormalização ou ansatz de Bethe. No entanto estes métodos não podem ser estendidos trivialmente para o caso da rede de impurezas, atualmente atacado com métodos com estrutura de bandas renormalizada, expansão em  $1/N$ , líquido de Fermi etc..

Pretendemos resolver o problema de Kondo aplicando um método que possa posteriormente ser aplicada à rede de Anderson. A princípio estamos interessados em estudar o caso de baixas temperaturas, que congela a impureza em uma magnetização constante. O ponto de partida é escrever a Hamiltoniana de Kondo usando uma base para os elétrons de condução que já inclua a nuvem de compensação eletrônica que forma-se em volta da impureza, com spin contrário. O objetivo é permitir que a teoria da perturbação tipo Rayleigh Schrödinger seja usada, o que não é possível se usamos uma base de ondas planas. Esta base é formada por uma função de onda ligada de energia negativa, que possui spin contrário ao da impureza, e por um contínuo de estados livres, que podem incluir uma fase gerada pelo potencial da impureza.

## STUDY OF MAGNETIC HYPERFINE DATA ON RARE EARTH IMPURITIES IN Fe AND Ni: NON-ORBITAL CONTRIBUTION

A. L. de Oliveira<sup>1</sup>, N. A. de Oliveira<sup>2</sup> and A. Troper<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro

<sup>2</sup> Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )

Rua São Francisco Xavier, 524, 20550-013, Rio de Janeiro

**Key Words:** magnetic hyperfine fields, rare-earth impurities, ferromagnetic 3d-hosts

Hyperfine data on rare-earth impurities in the ferromagnetic transition hosts Fe and Ni are theoretically discussed in terms of conduction electron polarization ( CEP ) and d-electron core polarization ( CP ). These contributions are calculated through a simple model<sup>1</sup>, where one considers the local charge perturbation and the next-neighbor perturbation due to the impurity and we adopt a Hartre-Fock approximation for the description of the electron-electron correlation. A simple self-consistent procedure enables us to calculate the hyperfine fields at the rare earth sites in LuM, LaM, GdM and YbM ( M = Fe, Ni ), where no orbital contribution exists, and one gets a good agreement with experimental data. We also discuss the non-orbital contribution and the sign of the total magnetic hyperfine field in cases where the orbital contributions is dominant as, e.g. EuM, TbM and DyM alloys, which show to be consistent with previous works in the literature<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> N. A. de Oliveira, A. A. Gomes and A. Troper, Phys. Rev. B, 52 ( 1995 ) 9137

<sup>2</sup> see for instance W. D. Brewer, Hyp. Int, 59 ( 1990 ) 201, and references therein

( CNPq )

## DENSIDADE ESPECTRAL PARA O MODELO DE ANDERSON DE DUAS IMPUREZAS

Cíntia Aguiar de Paula e Luiz Nunes de Oliveira

Depto. Física e Informática - Instituto de Física de São Carlos - USP

**Palavras-Chave:** modelo de Anderson , densidade espectral , grupo de renormalização numérico

Utilizamos o Modelo de Anderson para estudar a densidade espectral das impurezas em ligas magnéticas diluídas. O estado fundamental deste modelo depende fortemente da competição entre a interação RKKY  $I$  e a temperatura Kondo  $T_K$ . Essa competição gera três regimes característicos:  $|I| \ll k_B T_K$ , regime Kondo;  $-I \gg k_B T_K$ , regime ferromagnético;  $I \gg k_B T_K$ , regime antiferromagnético. Estamos calculando a densidade espectral com uma extensão do Grupo de Renormalização Numérico (GRN) que permite manter a assimetria partícula-buraco natural do modelo. O Hamiltoniano tem simetrias de carga, spin e inversão. Esta última permite que se separem os estados de condução em canais par e ímpar. Podemos assim calcular as componentes par e ímpar da densidade espectral e analisá-las para cada um dos três regimes. Esperamos no regime Kondo, onde a interação RKKY pode ser desconsiderada, densidades par e ímpar iguais à densidade de uma impureza. No regime ferromagnético há formação de um estado tripleto cujo momento é blindado ao baixar-se a energia: primeiro o canal par da banda de condução reduz o spin do tripleto de  $s=1$  para  $s=1/2$ , realçando a densidade par; em seguida o canal ímpar reduz o spin de  $s=1/2$  para  $s=0$ , realçando a densidade ímpar. No regime antiferromagnético, a interação RKKY conduz à formação de singleto a energias  $\varepsilon \approx I$ ; para  $\varepsilon \ll I$  espera-se que a densidade espectral ímpar tenha comportamento singular. Comparada as propriedades termodinâmicas, a densidade espectral carrega mais informações. Dentre suas vantagens podemos citar (i) a possibilidade de se comparar as densidades par e ímpar, (ii) a nítida separação entre excitações tipo partícula e tipo buraco, (iii) seu comportamento anômalo a baixas energias, que ajuda a identificar o regime Kondo e distingui-lo dos regimes ferro- e antiferromagnéticos, e (iv) a possibilidade de interpretações físicas nas regiões de crossover.

(FAPESP, CNPq, FINEP)

## PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE INTERMETÁLICOS DE TERRAS RARAS E METAIS DE TRANSIÇÃO.

*N.A de Oliveira, P.J. von Ranke*  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro  
*L. Palermo*  
Universidade Federal Fluminense  
*A.Caldas*  
Universidade Gama Filho

*Palavras-Chave:* intermetálicos, campo cristalino, integral funcional

Neste trabalho é desenvolvido um modelo teórico para calcular as propriedades magnéticas dos intermetálicos de terras raras e metal de transição. Este modelo parte de um Hamiltoniano a duas subredes acopladas, considerando elétrons itinerantes e estados localizados em interação e uma interação com campo cristalino. Neste modelo, a interação Coulombiana entre os elétrons itinerantes é tratada pelo método da integral funcional e a interação entre os estados localizados por uma aproximação de campo molecular. No cálculo das grandezas magnéticas algumas aproximações são utilizadas: i) aproximação estática para tratar os campos fictícios inerentes ao método da integral funcional ii) aproximação de bandas homotéticas para tratar as duas subredes do intermetálico; iii) o modelo de carga pontual para considerar os efeitos do campo cristalino. Uma aplicação do modelo é feita para o intermetálico  $\text{PrCo}_2$ . Os resultados obtidos, usando uma densidade de estados modelizada de cálculos primeiros princípios e um conjunto de parâmetros fixos para este intermetálico mostram um bom acordo com os dados experimentais.

## INTERAÇÃO DE TROCA INDIRETA ENTRE SPINS LOCALIZADOS

*Carmen Lúcia C. Ochi*  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )

*Norberto Majlis*  
Universidade Federal Fluminense ( UFF )

*Palavras -Chave:* impurezas, semicondutor, RKKY

Evidências experimentais em Si:P mostram a existência de alguns spins localizados na fase metálica. Motivados por estes resultados, propomos um modelo a fim de investigar o tipo de interação de troca indireta entre spins localizados, numa banda de impurezas de um semicondutor, via os demais elétrons desta mesma banda. Para isto, utilizamos um Hamiltoniano tight-binding na base de orbital  $s$ , de elétrons independentes. As impurezas estão distribuídas aleatoriamente dentro do cubo e suas posições foram geradas por técnica de Monte Carlo.

Com o objetivo de estudarmos o comportamento da susceptibilidade magnética estática em função da distância entre os spins localizados, num intervalo razoável, se fez necessário utilizarmos um sistema de 1000 partículas, e devido a flutuação, a susceptibilidade obtida é resultante de uma média configuracional sobre aproximadamente 200 configurações, e isto foi feito para diversas concentrações. Os resultados mostram que esta interação é do tipo RKKY, apresentando uma troca de fase típica de sistemas dopados. Este efeito torna-se mais evidente à baixas concentrações, onde existe maior probabilidade de termos partículas isoladas, funcionando como centros espalhadores.

Comparações com outros resultados obtidos por nós, e já anteriormente apresentados, os quais foram feitos utilizando um modelo desenvolvido por Matsubara e Toyozawa (modelo MT), também na aproximação de elétrons fortemente ligados e na base  $s$ , que utiliza o formalismo da função de Green e tem por finalidade tratar através de métodos gráficos e perturbativos a desordem de uma banda de impurezas, indicam que no modelo MT a susceptibilidade magnética apresenta um caráter mais "metálico" comparado aos resultados de simulação.

## THE SELF-CONSISTENT APPROXIMATION APPLIED TO THE PLANE-ROTATOR SYSTEM IN 2D WITH LONG-RANGE INTERACTIONS

M.E. Gouvêa and A.S.T. Pires

Departamento de Física, UFMG, Belo Horizonte, MG 30161-970, Brazil

*key-words:* magnets, vortices, spinwaves.

The self consistent harmonic approximation (SCHA) has been very successful in describing a variety of systems ranging from anharmonic rare gas solids, the quantum crystals of solid helium, to magnetic systems - as will be discussed in this work. The SCHA replaces the Hamiltonian of a system by an effective Hamiltonian with temperature dependent renormalized parameters. The estimates obtained for  $T_c$  for several systems, via SCHA, are in very good agreement with results obtained via more sophisticated techniques. Spin models in which only the nearest-neighbor interactions are taken into account have been extensively studied and the existence of an order-disorder phase transition is known to depend on the dimension of the system and on the number of spin components of the model. The SCHA has been applied, for example, to the XY and Planar-Rotator models in 2 and 3 dimensions and the estimated values for  $T_c$  when compared to Monte Carlo data (for the 2D Planar-Rotator) or to the values obtained from high temperature series (for 3D XY and Planar-Rotator) never show a deviation larger than 10%. The study of spin system interacting via long-range potentials decaying as  $r^{-p}$  has attracted theoretical attention due to the fact that these systems are related to mesoscopic tunnel junctions and it is now known that long-range attractive interactions can induce critical behavior in low-dimensional systems. Here we study the planar rotator 2D-model with ferromagnetic long-range interactions using the SCHA. The model Hamiltonian used is

$$H = \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} J_{\vec{r}, \vec{r}'} (S_{\vec{r}}^x S_{\vec{r}'}^x + S_{\vec{r}}^y S_{\vec{r}'}^y)$$

where  $J_{\vec{r}, \vec{r}'} = J|\vec{r} - \vec{r}'|^{-p}$  is the isotropic long-range interaction. We impose  $p > 2$ , use  $S = 1$  and consider the cases: a)  $p=3$ , for which an order-disorder transition is predicted, b)  $p=4$  because this value represents a border line for the existence or not of that kind of transition, and c)  $p=5$  where orientational disorder must occur for all temperatures. The values obtained for the transition temperatures are  $3.58J$ ,  $2.33J$  and  $1.92J$  for  $p = 3, 4, 5$ , respectively. The Monte Carlo results for  $p = 3$  and  $p = 4$  are, respectively,  $T_c = 3.96J$  and  $T_c = 2.23J$ . We also analyse the behavior of the spin-stiffness  $\rho$  in function of  $T$  and  $p$ : as  $p$  increases, we note that  $\rho(T)$  tends to the behavior obtained for the nearest-neighbor model. (CNPq and FINEP)

## RECONSTRUÇÃO DE IMAGEM DE DEFEITOS EM ESTRUTURAS FERROMAGNÉTICAS ATRAVÉS DA INVERSA GENERALIZADA

A. C. Bruno e E. Andrade Lima

Laboratório de Supercondutividade Aplicada e Magnetismo

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Rua Marquês de São Vicente 225, Rio de Janeiro, RJ 22453-900

*Palavras-Chave:* Ensaios-Não-Destrutivos, Flux-Leakage, SQUID

O desenvolvimento do SQUID (Superconducting QUantum Interference Device) como o dispositivo mais sensível para medida de campos magnéticos, abre uma nova perspectiva para a área de Ensaios Não Destrutivos quantitativos que utilizam técnicas magnéticas. O objetivo deste método é o de reconstruir a distribuição de fontes magnéticas dentro de um volume inacessível a partir de medidas magnéticas feitas no exterior deste volume. Em muitas situações quando o material está magnetizado, campos de fuga devido à falhas no material podem ser modelados por um dipolo magnético ou um conjunto de dipolos corretamente posicionados na região do defeito. A abordagem que nós utilizamos modela a distribuição desconhecida por uma matriz de dipolos com posições fixas e amplitudes a serem determinadas. Desta forma o campo magnético medido  $H = Lq$  pode ser descrito com uma função linear das amplitudes a serem determinadas  $q$ , onde  $L$  é a matriz que descreve a geometria da distribuição. Este sistema pode ser resolvido levando a uma solução do tipo  $q = L^{-1}H$  onde  $L^{-1}$  é a inversa generalizada de  $L$ . Isto pode ser conseguido através da decomposição da matriz  $L$  em valores singulares. Esta inversa minimiza o quadrado da diferença entre campo magnético medido e o campo magnético resultante das amplitudes determinadas. Além disto a solução encontrada tem norma mínima. Este método foi aplicado com sucesso em situações onde seria difícil de distinguir através da observação do campo magnético gerado, defeitos pontuais e profundos de defeitos extensos e superficiais.

(CNPq, RHAe, FINEP, PETROBRÁS)

## ONSAGER REACTION FIELD OF THE ONE DIMENSIONAL FERROMAGNET WITH LONG RANGE INTERACTIONS

*Antonio Sergio Teixeira Pires and Maria Elizabeth Gouvea*

Departamento de Física , Instituto de Ciencias Exatas , Universidade Federal de Minas Gerais

*Palavras -Chaves* : Onsager , Reaction Field , One dimensional

The Onsager reaction field ( ORF) theory , proposed by Onsager in 1936 , has recently show a resurgence in the literature . For the two dimensional Heisenberg model the theory predicts correctly the absence of long range order for any  $T > 0$  and produces an exponentially divergent correlation length as  $T \rightarrow 0$  . Also ORF ideas have been extended successfully to spin glasses and itinerant electron systems . The ORF theory is extremely simple , physically transparent and captures many of the essential features inferred from highly sophisticated approaches . The theory provides a self consistent modification of the mean field approximation ( MFA ) to account for the crucial effects of local correlations . In magnetic systems the MFA approach does not give a self - consistent correlation function between spins located in different sites . The idea in the ORF is that the part of the local field , acting on a given spin , which arises from the surrounding polarization due to the instantaneous orientation of the spin in question , should not be included in the effective orienting field . That polarization simply follows the motion of the spin in question and thus does not favor one orientation over another . This is a short range order effect which the MFA does not take into account . Generally this short range is included only for temperatures  $T$  above the critical temperature  $T_c$  ; the problem for  $T < T_c$  is considerably more difficult , and the reaction field in this case , is only a small correction to the mean field associated with the spontaneous magnetization , except for  $T$  very close to the critical temperature . In this work we apply the ORF formalism to study the one dimensional ferromagnet with exchange interaction decaying as  $r^{-p}$  ( long - range interaction ) . We shown that the ORF treatment appears consistent not only with the fact that a transition to the ordered phase exists when  $1 < p < 2$  , but also that the system is of necessity disordered when  $p > 2$  .

( CNPQ , FINEP )

## A THEORY OF THE METAL NONMETAL TRANSITION IN RARE-EARTH METALLIC SYSTEMS: A FUNCTIONAL INTEGRAL APPROACH.

*Marcus Vinicius Tovar Costa<sup>1</sup>, Nilson Antunes de Oliveira<sup>2</sup>, Gloria Miguel Japiassú<sup>3</sup> and Amós Troper<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro, 22290-180, RJ, Brazil

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

Rua São Francisco Xavier, 524, Rio de Janeiro, 20550-013, RJ, Brazil

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Caixa Postal 68528, Rio de Janeiro, 21945-970, RJ, Brazil

*Key words*: metal-nonmetal transition, functional integral approach, rare-earth metallic systems

We present a theory suitable to describe the metal-nonmetal transition as function of applied pressure and temperature. We adopt a two-band model and electronic correlations are treated via a functional integral method<sup>1</sup>, in the static approximation framework. We calculate the two-particle Green's function, and obtain a critical value of the effective mixing term<sup>2</sup> at  $T = 0$  which gives rise to a renormalized hybridization gap. We discuss the effects of pressure and temperature on the electronic structure of the system and in particular on the renormalized hybridization gap. Some comparisons between the present theory and periodic Anderson lattice model (PAM) are shown in the context of available experimental data, e.g., mixed valence Sm compounds such as SmS and SmB<sub>6</sub> under pressure, Y<sub>6</sub> metal under pressure, and  $\alpha - \gamma$  Ce transition.

<sup>1</sup> See, for instance, Hideaki Ishikawa, Phys. Rev. **B28**, 5643 (1983).

<sup>2</sup> M. A. Continentino, G. M. Japiassú, and A. Troper. Phys. Rev. **B49**, 4432 (1994); *ibid*, to be published in J. Appl. Phys., April 1996.

(CNPq)

## LOCAL MAGNETIZATION AND HYPERFINE FIELD SYSTEMATICS OF 5s-p IMPURITIES IN Ni AND Gd HOSTS

A. L. de Oliveira<sup>1</sup>, N. A. de Oliveira<sup>2</sup> and A. Troper<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro

<sup>2</sup> Universidade do Estado do Rio de Janeiro ( UERJ )

Rua São Francisco Xavier, 524, 20550-013, Rio de Janeiro

**Key Words:** hyperfine fields, local moments, ferromagnetic hosts

Magnetic hyperfine data of 5s-p impurities diluted in ferromagnetic Ni and Gd hosts are described within a simple model which is an extension on that one of Daniel and Friedel<sup>1</sup>. We also include in the present model the effect of next-neighbor perturbation, due to the translational invariance break induced by the s-p impurity<sup>2</sup>. Using realistic Ni and Gd density of states extracted from first principle band calculations, we perform a self-consistent calculation of the local magnetic moments at the impurity sites. Then one obtains the conduction electron polarization ( CEP ) hyperfine field. It is found that the model can explain the different hyperfine field trends observed in Ni and Gd hosts<sup>3</sup>, e.g., a change of sign behavior in the Ni case and a remaining negative value along the s-p series in the Gd case.

C. E. Leal, O. L. T. de Menezes and A. Troper, *Solid St. Comm.* **50**, ( 1984 ) 619; C. E. Leal and A. Troper, *ibid.*, **61**, ( 1987 ) 317

see for instance N. A. de Oliveira, A. A. Gomes and A. Troper, *Phys. Rev. B*, **52** ( 1995 ) 9137, and references herein

W. D. Brewer, *Hyp. Int.*, **59** ( 1990 ) 201

( CNPq )

## COMPLETEZA NA REDE DE ANDERSON COM U FINITO

Marcos S. Figueira

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ Brasil

Mario E. Foglio

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil

**Palavras-Chave:** rede de Anderson, expansão em cumulantes, completeza

A completeza na rede de Anderson com  $U \rightarrow \infty$  requer que a equação  $n_0 + n_\sigma + n_\bar{\sigma} = 1$  seja satisfeita para cada sítio da rede, onde  $n_0$ ,  $n_\sigma$ ,  $n_\bar{\sigma}$  são os números de ocupação dos estados sem elétron f, com um elétron f de spin  $\sigma$  ou  $\bar{\sigma}$  respectivamente. O uso dos operadores de Hubbard no tratamento permite eliminar do espaço dos estados, aqueles que tem dois elétrons f em cada sítio, pois para  $U \rightarrow \infty$  a ocupação destes estados deve ser nula. A partir de uma expansão diagramática em cumulantes (M. S. Figueira, G. G. Martinez e M.E. Foglio, *Phys. Rev. B* **50**, 17933 (1994)) consideramos a aproximação de cadeias (AC) para as funções de Green (FG) (XVIII ENFMC, M. E. Foglio e M. S. Figueira, pg 205), que não satisfaz a relação de completeza. Nesse trabalho foi verificada uma conjectura sobre como devem ser as famílias de diagramas que satisfazem essa propriedade: no caso da AC é necessário agregar diagramas com um cumulante de quarta ordem para recuperar a completeza, e chamamos ACC a esta aproximação.

Para entender melhor esse problema, estudamos a rede de Anderson com  $U$  finito, e neste caso a completeza se escreve  $n_0 + n_\sigma + n_\bar{\sigma} + n_2 = 1$ , onde  $n_2$  é o número de ocupação do estado com dois elétrons f. Calculamos as FG na AC, e mostramos analiticamente que a completeza é recuperada nos dois limites  $U \rightarrow \infty$  e  $U \rightarrow 0$ . No caso  $U \rightarrow \infty$ , o  $n_\sigma$  assume diferentes valores dependendo de qual FG é usada no seu cálculo, mostrando-se com isso que essa é a origem da falta de completeza do cálculo no espaço sem o estado de dupla ocupação. A correlação entre os elétrons de spin oposto não se cancela no limite  $U \rightarrow 0$  para a AC, o que indica que esta aproximação não produz as FG exatas para os operadores de Hubbard individuais apesar de originar as FG exatas para os operadores fermiônicos. Na ACC para  $U$  finito a completeza é conservada no limite  $U \rightarrow 0$ . (FAPESP, CNPq, FAEP-Unicamp)

## DIAGRAMA DE FASE NO MODELO D-VETORIAL NA VERSÃO SBC: APLICAÇÃO AO $\text{KNi}_p\text{Mg}_{1-p}\text{F}_3$ .

*Douglas F. de Albuquerque<sup>a,b</sup> e I.P. Fittipaldi<sup>a</sup>*

<sup>a</sup>Departamento de Física, CCEN-UFPE  
50670-901 Recife-PE Brasil

<sup>b</sup>Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UNB  
70919-970 Brasília-DF

*Palavras Chave:* diluição, diagrama de fase

O modelo de diluição por sítio-ligação correlacionada (site-bond-correlated, SBC) foi proposto para tratar as diferenças observadas experimentalmente através de medidas de ressonância nuclear magnética (RMN) entre os compostos  $\text{KNiF}_3$  e  $\text{KMnF}_3$  quando diluídos por átomos de  $\text{Mg}^1$ . A abordagem SBC trata o acoplamento magnético entre átomos primeiros vizinhos (n.n) como sendo dependentes da ocupação dos outros átomos também primeiros-vizinhos. O presente trabalho estuda o modelo SBC dentro de uma versão clássica do modelo D-vetorial com desordem em uma rede hipercúbica d-dimensional na estratégia de grupo de renormalização na aproximação de campo médio (MFRG). O estudo é feito tratando dois diferentes modelos para as interações de intercâmbio entre átomos (denominados modelos A e B), onde a ocupação dos outros sítios n.n átomos depende de um parâmetro de correlação  $\alpha$ . As linhas críticas das fases ferromagnética no plano T-p são obtidas para alguns valores deste parâmetro. Os casos particulares para  $D=1, 3$  e  $\infty$  são estudados, e a declividade em  $p=p_c$  apresenta comportamentos distintos em cada caso. Por outro lado, a declividade  $\Delta(\alpha)$ , em  $p=1$  é obtida e observa-se que a relação  $(\Delta \pm 1)/\Delta(0)$  tem dependência com os modelos A e B, mas independe da dimensionalidade do spin D. Comparações de nossas estimativas numéricas para o diagrama de fase, Txp, com os resultados experimentais<sup>2</sup> no composto  $\text{KNi}_p\text{Mg}_{1-p}\text{F}_3$  revelam excelente concordância na versão SBC no modelo B, com  $\alpha = 0.145$ .

<sup>1</sup>Douglas F. de Albuquerque & J. Ricardo de Sousa, Phys. Lett. A 14, 421 (1992).

<sup>2</sup>J.A. de Aguiar, M. Engelsberg & H.J. Gungenheim, J. Mag. Mag. Mat. 54-57, 107 (1986).

## PASSIVAÇÃO DE DEFEITOS EM CÉLULAS SOLARES DE SILÍCIO MULTICRISTALINO

*E.M.Sato e \*M.A.G.Soler*

Laboratório de Microeletrônica - Escola Politécnica - Universidade de São Paulo

\*Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas - Universidade de Brasília

Palavras-chave: passivação de defeitos, célula solar, nitreto de silício

A região do emissor de uma célula solar apresenta uma elevada concentração de defeitos, resultantes da alta densidade de dopagem, dos defeitos de superfície e do substrato. O silício multicristalino apresenta grãos colunares e possui defeitos estruturais, além dos contornos de grãos. Visando minimizar os efeitos desses defeitos sobre o desempenho dos dispositivos, a difusão de hidrogênio tem sido utilizada para neutralizar esses defeitos. Com o objetivo de passivar a região do emissor de células solares de silício multicristalino, foi depositada uma camada anti-refleitora (CAR) de nitreto de silício, através da técnica PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition). As condições de deposição foram otimizadas visando obter-se além do efeito de CAR, o da introdução de hidrogênio durante a deposição. Como fonte, utilizou-se os gases amônia e silana. Nas células de referência foi depositada uma camada de pentóxido de tântalo. A película de nitreto apresentou as características: espessura de 750Å, índice de refração de 1,97, gap ótico de 2,67eV e concentração atômica de hidrogênio de 32%. As células foram caracterizadas, antes e após a deposição das películas, através da obtenção de curvas IxV e de resposta espectral. Os efeitos foram observados através dos resultados obtidos para a corrente de curto-circuito e para a eficiência quântica. As significativas melhoras obtidas na corrente de curto-circuito, com aumento maior do que 40%, podem ser explicadas analisando-se as curvas de eficiência quântica relativa, onde nota-se que, para comprimentos de onda em torno de 400nm, o desempenho das células com CAR de nitreto é sensivelmente maior do que o das células de referência. Estes resultados mostram o efeito de passivação da região do emissor, que ocorre durante a deposição da película de nitreto, obtida através da introdução de hidrogênio. (FAPESP, CNPq)

## BOMBARDEAMENTO DE LiF POR FEIXES DE PARTÍCULAS: CRIAÇÃO DE DEFEITOS, AGREGAÇÃO E DESSORÇÃO

*Luiz Gustavo Jacobsohn, João Alberto Mesquita Pereira, Marco Cremona\*,  
Rosane Riera Freire, Enio Frota da Silveira, e Raul Almeida Nunes\**

Departamento de Física

\*Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Palavras-Chave: defeitos, agregação, dessorção

De acordo com o modelo usualmente aceito para a geração de defeitos através do bombardeamento de elétrons ou íons em halogenetos alcalinos, a promoção de um dado elétron da banda de valência pode levar à criação de um par de defeitos F, H. A temperatura ambiente, o centro F é pouco móvel enquanto o centro H difunde através da rede e ao atingir a superfície, provoca a dessorção (emissão) de um átomo halogênico. O resultado é uma acumulação de metal alcalino na superfície acompanhada do aparecimento de uma banda de absorção característica dos centros F.

Neste trabalho, amostras de LiF foram irradiadas por feixes de elétrons (10-25 keV) e de íons de nitrogênio (2-3 MeV) com doses variadas. Técnicas de espectroscopia ótica e PDMS foram usadas respectivamente para obter as concentrações absolutas dos centros de cor (centro F e agregados) no interior do LiF e as relativas de Li na superfície em função da dose de radiação.

Resultados da análise feita por PDMS revelam de fato um aumento da concentração de Li na superfície. No entanto, as medidas de absorção ótica acusam o aparecimento de centros  $F_2$  (dois centros F) evidenciando uma maior complexidade do fenômeno. Ainda é uma questão em aberto determinar se os centros  $F_2$  são criados diretamente pelo projétil ou pela agregação de 2 centros F. Por isso simulações de Monte Carlo foram realizadas para estudar as distribuições de energia depositada por feixes de elétrons ou de íons de nitrogênio em LiF. Com os dados obtidos pode-se ilustrar o modelo acima descrito e testar uma hipótese do mecanismo de agregação para a produção de centros de cor.

(MCT, CAPES, CNPq)

## DETERMINAÇÃO DA SIMETRIA DA SUPERESTRUTURA DE HIDROGÊNIO NO HIDRETO METÁLICO $ZrV_2H_4$

*JOSÉ SUASSUNA FILHO*

Departamento de Física do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Federal da Paraíba - Campus II -  
Campina Grande - PB

*Palavras-Chave:* hidreto, superestrutura, ressonância

O hidreto  $ZrV_2H_x$  tem despertado considerável interesse científico e tecnológico por ser estável, absorver grande quantidade de hidrogênio em condições normais, além de se constituir num dos poucos hidretos metálicos ternários a exibir uma superestrutura de ions hidrogênio na estequiometria  $ZrV_2H_4$ . Neste trabalho nós evoluímos a Hamiltoniana de campo cristalino induzido pelos quatro ions de hidrogênio, assumindo ions negativos (modelo aniônico H<sup>-</sup>) ocupando os quatro sitios intersticiais do tipo 2/2A disponíveis na rede do  $ZrV_2$ , abaixo da temperatura de transição da superestrutura. Os cálculos evidenciam uma sub-rede de hidrogênio de simetria tetraedral em torno dos átomos de zircônio. Os parâmetros de quarta e sexta ordem do campo cristalino ( $B_4$  e  $B_6$ ) bem como o parâmetro de Lea, Leask e Wolf ( $x$ ) foram calculados ( $x = -0.1$ ), resultando num estado fundamental  $\Gamma_7$  para o ion  $Er^{3+}$  substitucional ao  $Zr$  na matriz  $ZrV_2H_4 \cdot Er$ . Realizamos experiências de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) no hidreto  $ZrV_2H_x$ .  $Er$  a baixas temperaturas e os resultados experimentais obtidos ( $g_{ex} = 6.75 \pm 0.05$ ) são inteiramente consistentes com um estado fundamental  $\Gamma_7$  para o  $Er^{3+}$ , teoricamente previsto. A carga negativa assumida para os ions de hidrogênio corresponde ao modelo aniônico (H<sup>-</sup>) e está consistente como o modelo de Miedema de transferência de cargas no processo de formação de hidretos metálicos. De acordo com este modelo, elétrons são transferidos de átomos menos eletronegativos (Zr ou V) para átomos mais eletronegativos (H). Em resumo, cálculos e resultados experimentais de RPE confirmam a ocorrência de uma superestrutura de hidrogênio no  $ZrV_2H_4$  com os ions H<sup>-</sup> ocupando os quatro sitios intersticiais tipo 2/2A ( $2Zr$ ,  $2V$ ) disponíveis, resultando numa sub-rede de hidrogênio de simetria tetraedral, em torno do átomo  $Zr$ . Nossos resultados estão também consistentes com outros obtidos por difração de neutrons e confirmam a RPE como uma ferramenta poderosa no estudo de hidretos metálicos (CNPq).

## ESTUDO DE CRISTAIS LASER ATIVOS ATRAVÉS DA ANÁLISE TÉRMICA: $LiSrAlF_6$

*ANA MARIA DO ESPÍRITO SANTO, SONIA LÍCIA BALDOCHI, SPERO PENHA MORATO*

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN/CNEN - SP  
Divisão de Materiais Optoeletrônicos

*JIVALDO DO ROSÁRIO MATOS*

Instituto de Química da Universidade de São Paulo - USP

*Palavras-Chave:* síntese de fluoretos, refino por zona,  $LiSrAlF_6$

Atualmente, os lasers de estado sólido são amplamente utilizados em diversas áreas de pesquisa e de desenvolvimento tecnológico. As crescentes aplicações de diferentes monocristais nos dispositivos optoeletrônicos têm incentivado o desenvolvimento paralelo na obtenção de novas matrizes laser ativas. No início dos anos 90, obteve-se ação laser em cristais de  $LiSrAlF_6$  e  $LiCaAlF_6$  ativados com Cr. Estes compostos apresentam uma combinação de características que os tornam lasers sintonizáveis. Um cristal laser ativo necessita fundamentalmente de uma alta qualidade óptica que está diretamente relacionada ao processo de crescimento. Um fator de extrema importância é o grau de pureza e o processamento dos reagentes para a obtenção do composto final utilizado no crescimento do monocristal. O objetivo deste trabalho é o estudo dos processos de síntese e purificação destes compostos para o crescimento de monocristais com alto grau de pureza. Para tal finalidade, à partir da Termogravimetria (TG) e Análise Térmica Diferencial (DTA), faz-se um controle quanto as características dos reagentes comerciais de partida (óxidos e carbonatos correspondentes) e dos fluoretos-base obtidos através da Hidrofluorinação ( $SrF_2$ ,  $CaF_2$ ,  $AlF_3$ ,  $CrF_3$ ). O composto quartenário é obtido por fusão dos fluoretos-base em atmosfera reativa e posteriormente purificado através da técnica de Refino por Zona. Foi observado, através da DTA, que a presença de impurezas altera o comportamento da fusão do composto (congruente ou incongruente) e que ocorre alteração da estequiometria de partida devido à evaporação de um dos componentes.

(FAPESP)

## MEDIDAS DE ATRITO INTERNO E FREQUÊNCIA EM MOLIBDÊNIO CONTENDO OXIGÊNIO E NITROGÊNIO

Márcio Rogério Capelli<sup>1</sup>, Carlos Roberto Grandini<sup>1</sup> e Odila Florêncio<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP-Câmpus de Bauru

<sup>2</sup>Departamento de Física, UFSCar

*Palavras-Chave:* anelasticidade, atrito interno, molibdênio

As medidas de atrito interno vem sendo muito utilizadas há mais de cinquenta anos no estudo de relaxações anelásticas devido à reorientação induzida por tensão de elementos intersticiais presentes em metais do grupo V, com estrutura cúbica de corpo centrado. Porém, este estudo não tem sido tão extensivo no caso de metais do grupo VI, como por exemplo, molibdênio e tungstênio. Neste trabalho, foram efetuadas medidas do atrito interno e da frequência como função da temperatura em molibdênio contendo oxigênio e nitrogênio dissolvidos em solução sólida na matriz metálica. As amostras utilizadas constituem monocristais de molibdênio, produzidas na Rice University (USA) através da técnica de fusão por feixe de elétrons. Estas amostras foram medidas utilizando-se a técnica do pêndulo de torção invertido, operando num intervalo de temperatura compreendido entre 300 e 700 K, com taxa de aquecimento de 1.0 K/min. A frequência de oscilação utilizada foi em torno de 1.0 Hz. A deformação máxima sofrida pela amostra esteve sempre abaixo de  $10^{-5}$ . Os dados de atrito interno e frequência de oscilação foram obtidos através do decaimento de oscilações livres do pêndulo e coletados automaticamente via microcomputador. Os resultados obtidos mostram estruturas de relaxação complexas onde foram identificados os processos de relaxação devido à reorientação induzida por tensão de um átomo de oxigênio e um átomo de nitrogênio em torno de átomos de molibdênio da matriz metálica (processos Mo-O e Mo-N) e, pares de átomos de oxigênio e nitrogênio em torno de átomos de molibdênio da matriz metálica (processos Mo-O-O e Mo-N-N).

(FUNDUNESP, CNPq e FAPESP)

## PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE COMPOSTOS $La_{1-x}Ln_xNiO_3$ ( $Ln = Pr, Nd, Sm; x = 0.0, 0.05, 0.10, 0.15, 1.0$ ) ATRAVÉS DE PRECURSORES SOL-GEL

Marcia Tsuyama Escote e Renato de Figueiro Jardim

Instituto de Física - Universidade de São Paulo, C.P. 66318, CEP 05389-970, São Paulo  
Brasil

*Palavras-chave:* óxidos de terras-raras, sol-gel, transição metal-isolante

Óxidos de terras-raras-níquel  $LnNiO$ :  $Ln = La, Pr, Nd, Sm$ ; têm merecido grande interesse devido ao comportamento não usual de suas propriedades magnéticas e de transporte. O  $LaNiO_3$  comporta-se como um condutor até temperaturas de  $\approx 1.5$  K, enquanto os outros compostos com Pr, Nd e Sm apresentam uma transição de fase do tipo metal-isolante entre 135 e 400 K. Neste trabalho pretendemos ampliar o conhecimento da transição metal-isolante nestes materiais através da produção e caracterização de compostos de  $LnNiO_3$  e suas soluções sólidas. Sendo assim, amostras policristalinas de  $La_{1-x}Ln_xNiO_3$ ;  $0.0 \leq x \leq 1.0$ ; foram produzidas através de precursores sol-gel. As amostras foram tratadas ao ar e sob pressão de  $O_2$  (até 70 atm) e no intervalo de temperatura  $300^\circ C \leq T \leq 950^\circ C$ . A caracterização destas amostras foi feita através de difração de raios-x R-X e medidas de resistividade elétrica  $\rho(T)$ . Os resultados de R-X mostraram que as amostras de  $La_{1-x}Ln_xNiO_3$  ( $Ln = Ce, Sm, Nd, Pr, 0.0 \leq x \leq 0.15$ ), tratadas em atmosfera de  $O_2$  a  $950^\circ C$ , são compostas de duas fases cristalográficas diferentes: uma cúbica e uma outra romboédrica. Os resultados também mostraram que pequenas substituições de La por Ce estabilizam a fase romboédrica. Amostras dopadas com Ln e tratadas ao ar e a  $500^\circ C$  revelaram uma difusão insuficiente do dopante na matriz de  $LaNiO_3$ . Amostras de  $NdNiO_3$  tratadas a  $650^\circ C$  sob pressão de  $O_2$  são de fase única. Medidas de  $\rho(T)$  nestas amostras revelaram uma transição de fase do tipo metal-isolante que ocorre  $\approx 200$  K. Durante estas medidas verificou-se o aparecimento de histerese, sugerindo que a transição é de primeira ordem. Observou-se também que, abaixo de 200 K, o comportamento da  $\rho(T)$  não obedece a relação de Mott para um sistema tridimensional.

(FAPESP, CNPQ)

## ESTUDO DOS PROCESSOS DE PRODUÇÃO E DESTRUIÇÃO DOS CENTROS E', NO QUARTZO

*Leoncio Z. Gamarra, Toshiyuki Nakayima, Masao Matsuoka e Shiguelo Watanabe*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

*Palavras-Chave:* quartzo, centro E', ressonância de spin eletrônico,

O centro E', é um defeito fundamental no quartzo e tem sido investigado nos últimos 30 anos não só pela importância tecnológica nos campos de engenharia eletrônica, óptica e de comunicação, mas também pelo interesse na dosimetria de radiação e na datação. Foram investigados os efeitos de irradiação e de recozimento na produção e destruição dos centros E', em grãos de quartzo extraídos das dunas do rio São Francisco-Bahia, usando o método de ressonância de spin eletrônico (RSE). Neste trabalho os raios gama de  $^{60}\text{Co}$  foram utilizados para a irradiação da amostra à temperatura ambiente (10 a  $10^6$  Gy). Uma série de recozimentos sucessivos por 30 min cada um foi efetuada em temperaturas progressivamente crescentes e elevadas. A amostra natural sem irradiação artificial mostra um sinal de RSE típico caracterizado pelo fator g do centro E', (2,00029, 2,00049 e 2,00176). A intensidade do sinal decresce com o aumento da dose de irradiação até 500 Gy e, depois disso, mostra um crescimento da intensidade do sinal até 50000 Gy, sendo acompanhada com um sinal induzido a  $g = 2,001$ . Um recozimento a 170°C elimina completamente esse crescimento da intensidade do sinal de RSE induzido pela irradiação, junto com o sinal a  $g = 2,001$ . A intensidade do sinal de RSE de todas as amostras irradiadas com várias doses então começa a crescer com o aumento da temperatura de recozimento, chegando a máxima a 340°C, depois decresce e desaparece a 460°C. Considera-se que o aparecimento do sinal a  $g = 2,001$  está relacionado com a produção de centros E', modificados que são induzidos pela irradiação gama.

(CNPq, FAPESP)

## INFLUÊNCIA DE ELEMENTOS INTERSTICIAIS EM Nb E Nb-Zr NAS MEDIDAS DE ATRITO INTERNO

*Odila Florêncio<sup>1</sup>, Wantuir Aparecido de Freitas<sup>1</sup>, Hiroshi Tejima<sup>1</sup>, Walter José Botta Filho<sup>2</sup>,  
Carlos Roberto Grandini<sup>3</sup>*

(1) Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, C. P. 676,  
CEP 13565-905, São Carlos-S.P.

(2) Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de São Carlos, C.P.676,  
CEP 13565-905, São Carlos-S.P.

(3) Departamento de Física, Universidade Estadual Paulista, C.P.473,  
CEP 17033-360, Bauru - S.P.

*Palavras-Chave:* atrito interno, elementos intersticiais, nióbio-zircônio

Metais e ligas metálicas, de estrutura cristalina cúbica de corpo centrado, contendo elementos intersticiais (oxigênio, nitrogênio) em solução sólida, apresentam picos de relaxação mecânica quando submetidos a tensões cíclicas, fenômeno conhecido como Efeito Snoek, que pode ser estudado através de medidas de atrito interno. Estas medidas estão sendo realizadas em função da temperatura (no intervalo de 300K a 700K), num pêndulo de torção, em amostras de Nb e Nb-Zr (com 0,5 a 2,0% p.Zr) contendo diferentes teores de elementos intersticiais. Os resultados encontrados para o Nióbio estão sendo utilizados como referência para as ligas Nióbio-Zircônio, observando-se assim o efeito da interação do elemento substitucional com os elementos intersticiais no material em estudo. Os espectros de múltiplas relaxações mecânicas obtidos são decompostos em picos elementares de Debye e associados a interações matriz-intersticial (Nb-O, Nb-N) e substitucional-intersticial (Zr-O). Simultaneamente são obtidos espectros de difração de raios-X (método do pó) para informações sobre as estruturas cristalinas destes metais e as consequentes variações nos parâmetros de rede e precipitação de segundas fases. Apoio: CNPq, FAENQUIL-CEMAR.

## ESTUDIO POR RCN DE CRISTALES CON DESORDEN ORIENTACIONAL

*Sergio L. Gómez*  
LaNAIS de RMN, FaMAF, UNC  
*Mariano J. Zuriaga*  
LaNAIS de RMN, FaMAF, UNC

*Palavras-Chave:* desorden, resonancia, clusters

El estudio de cristales moleculares que presentan elementos de desorden, es la continuación lógica del estudio de cristales regulares. Se llevó a cabo un estudio del p-BromoCloroBenceno, del cual se sabe por estudios mediante difracción de Rayos X que presenta un desorden de tipo orientacional estático, por medio de la RCN (Resonancia Cuadrupolar Nuclear) ya que es una técnica sensible a variaciones del Gradiente del Campo Eléctrico en el sitio del núcleo resonante y por lo tanto permite estudiar las propiedades de orden local. Se buscó relacionar la forma de los espectros cuadrupolares (formas de línea, anchos, frecuencias centrales) con el elemento de desorden utilizando un modelo. El modelo adoptado para este sistema es el de una estructura ordenada de moléculas en donde aproximadamente la mitad de ellas, se desordenan siguiendo alguna distribución de probabilidades, rotando  $180^\circ$  la dirección del eje molecular. En otras palabras, se lo puede pensar como una aleación  $A_{1-x}B_x$  donde A y B son la misma molécula pero con orientaciones opuestas. Este es un modelo de clusters. Se obtuvo el espectro de FRCN (Frecuencias de RCN) para diversas temperaturas entre 317  $^\circ\text{K}$  y 88  $^\circ\text{K}$  mediante el método de reconstrucción de la señal, utilizando la secuencia de pulsos  $\pi/2-\pi$  de 50 y 100  $\mu\text{s}$ . En el rango de temperaturas observadas, el sistema presentó espectros cuadrupolares anchos, lo cual indica que el compuesto presenta un desorden estructural en ese rango de temperaturas. Esto fue corroborado mediante un análisis de la muestra en un equipo de ATD (Análisis Térmico Diferencial). Los espectros obtenidos fueron ajustados mediante la combinación del modelo de Cohen-Reif y el de Blinc, obteniéndose una excelente correlación lo cual indica que la distribución en clusters es un buen modelo del sistema.

(SECyT y CONICOR)

## RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA DE ESMERALDAS DE CAMPOS VERDES (GO)

*E. R. Azevêdo, F. Pelegrini, A. R. Lobato, I. J. Moraes, C. Lariucci*  
Departamento de Física - Universidade Federal de Goiás

*Palavras-Chave:* esmeralda, ressonância paramagnética, campo cristalino

O cristal natural de esmeralda resulta da substituição do íon  $\text{Al}(3+)$  pelo íon  $\text{Cr}(3+)$  na estrutura do mineral berilo ( $\text{Al}_2\text{Be}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}$ ). Como impureza substitucional o íon  $\text{Cr}(3+)$  é um centro paramagnético sensível para a investigação do campo cristalino e a caracterização da cor do cristal. Empregando a técnica de ressonância paramagnética eletrônica, determinamos, para amostras de esmeraldas naturais de Campos Verdes (Goiás), o parâmetro D que descreve o campo cristalino e os parâmetros espectroscópicos g-paralelo e g-perpendicular da impureza  $\text{Cr}(3+)$ . Avaliamos também, nas amostras investigadas, a concentração do íon  $\text{Cr}(3+)$ , correlacionando-a com a tonalidade da cor verde da amostra, caracterizada por espectrofotometria visível.

Apoio: CNPq.

## CORRELAÇÃO ENTRE MEDIDAS DE RESSONÂNCIA PARAMAGNÉTICA ELETRÔNICA E TERMOLUMINESCÊNCIA DE FLUORITA NATURAL IRRADIADA

*Gilberto Marcon Ferraz, Masao Matsuoka, Shiguo Watanabe*  
Universidade de São Paulo - SP

*Palavras-Chave:* Ressonância Paramagnética Eletrônica, Fluorita, Termoluminescência

Amostras de fluorita natural verde ( $\text{CaF}_2$ ), de origem Brasileira, sujeitas a um tratamento térmico a  $700^\circ\text{C}$  durante 20 minutos foram expostas a diferentes doses ( $5 \times 10^{-3}$  -  $5 \times 10^{-7}$  Gy) de radiação gama de  $^{60}\text{Co}$  e posteriormente, submetidas a uma série de tratamentos térmicos isócronos ( $150$  -  $350^\circ\text{C}$ ) de duração de 10 minutos. Foram então investigadas por ressonância paramagnética eletrônica (RPE) medida a temperatura ambiente e por termoluminescência (TL) na região entre a temperatura ambiente e  $350^\circ\text{C}$ .

Foram observados três sinais de RPE com os valores do fator g de 1,984(A), 2,017(B) e 2,015(C). As amostras tratadas termicamente a  $700^\circ\text{C}$  e irradiadas apresentaram os três sinais, enquanto que a amostra tratada termicamente a  $700^\circ\text{C}$  mostrou somente o primeiro sinal citado acima. A intensidade do sinal A decresceu com o aumento da dose, enquanto que a dos demais sinais variou inversamente. Supomos que o sinal A seja devido a íons de terras raras trivalentes, o sinal B seja relacionado com íons de terras raras divalentes e/ou centros de buraco e o sinal C seja devido a átomos de hidrogênio.

As amostras tratadas termicamente a  $700^\circ\text{C}$  e irradiadas mostraram dois picos na curva de emissão termoluminescente, a  $154^\circ\text{C}$  e  $250^\circ\text{C}$ . O resultado das medidas do tratamento térmico isócrono indica que o sinal de RPE com  $g = 2,017$  está ligado aos dois picos TL observados.

(CNPq)

## SISTEMATIZAÇÃO DE EXAMES PERICIAIS DE PEDRAS E METAIS PRECIOSOS

*A. E. Morcelli\**, *M. C. Salvadori\*\**, *E. Bittencourt\**, *M. A. Garavelli\**, *A. M. Verderramas\**,  
*A. Encide\** e *O. Negrini Neto\**

\* Instituto de Criminalística de São Paulo

\*\* Instituto de Física da USP

*Palavras-Chave:* pedra preciosas, metais preciosos, perícia

Neste trabalho visamos sistematizar os exames periciais realizados para determinação da autenticidade de gemas e metais preciosos através de Microscopia Eletrônica de Varredura e Difração de Raios-X, como métodos analíticos não destrutivos. Especificamente a análise quantitativa de impurezas presentes nas amostras em estudo, através de espectroscopia de energia dispersiva (EDS), associada à microscopia eletrônica de varredura, é de fundamental importância para identificar a procedência da amostra. Outros métodos de menor sofisticação também são utilizados, como a determinação de densidade do material e a observação de inclusões em pedras, com o objetivo de complementar os exames periciais. As análises são realizadas no Instituto de Criminalística de São Paulo, que dispõe dos seguintes equipamentos: um Microscópio Eletrônico de Varredura CamScan série 4 (equipado com microanálise) e um Difratômetro de Raios-X Phillips. As amostras padrões são obtidas entre as disponíveis no mercado ou em órgão público de recursos minerais. As amostras falsificadas são triadas pelo departamento de exames, análises e pesquisa do Instituto de Criminalística de São Paulo, de forma que se tem uma amostragem dos tipos de falsificação normalmente utilizados no país. Assim, pretendemos estabelecer uma metodologia definitiva para exames periciais de amostras com suspeita criminalística de falsidade, visando avaliar seu valor comercial, estendendo assim o alcance social de pesquisa.

## TERMOLUMINESCÊNCIA FOTOTRANSFERIDA NO QUARTZO

*Antônio José de Jesus Santos\**, *Piotr Trzesniak†*, *Mário Ernesto Giroldo Valerio\** e *José Fernandes de Lima\**

\*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, Campus Universitário  
49.100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

†Departamento de Física, Escola Federal de Engenharia de Itajuba, Itajuba, MG, Brasil

*Palavra-chave:* termoluminescência, quartzo, fototransferência.

O estudo do comportamento dos picos termoluminescentes do tratamento térmico e da exposição da luz UV pode contribuir para o entendimento do mecanismo de emissão TL do quartzo que é muito usado na determinação de idades arqueológicas. A iluminação com UV pode provocar o preenchimento direto das armadilhas ou pode aumentar ou diminuir as alturas dos picos induzidos pela radiação ionizante. O crescimento de um pico em consequência da diminuição de outro pode ser interpretado como sendo devido a transferência de cargas desde uma armadilha para outra. Esse efeito pode ser aplicado na datação arqueológica e na dosimetria de radiação. Neste trabalho estudamos a emissão termoluminescente do quartzo submetido a diferentes tratamentos térmicos e de irradiação. As medidas foram efetuadas com amostras em forma de pó com granulação entre 0.075 e 0.150 mm. As curvas de emissão foram realizadas no intervalo de temperatura de  $-135^{\circ}\text{C}$  a  $0^{\circ}\text{C}$ . As amostras foram realizadas em um forno de atmosfera aberta em temperaturas de até  $900^{\circ}\text{C}$ . Em seguida as amostras foram irradiadas com raios gama de cobalto, resfriadas até a temperatura de  $-135^{\circ}\text{C}$ , iluminadas com luz UV no próprio aparato de medida e finalmente submetidas ao processo de aquecimento. As amostras tratadas a  $400^{\circ}\text{C}$  e irradiadas com 300 Gy de raios gama apresentaram uma curva de emissão composta por cinco picos na região de temperatura entre  $-135^{\circ}\text{C}$  e  $0^{\circ}\text{C}$ . Esses resultados indicam que o processo utilizado tem possibilidades de ser transformado num método para a determinação da idade arqueológica.

## INFLUÊNCIA DA CONCENTRAÇÃO DE LA E DA TEMPERATURA DE SINTERIZAÇÃO NO $(\text{Pb},\text{La})\text{TiO}_3$

*E.C.S. Tavares, P.S. Pizani e J.A. Eiras*

Universidade Federal de São Carlos - Departamento de Física

*Palavras-chave:* Raman, PLT, "soft mode"

O titanato de chumbo ( $\text{PbTiO}_3$  - PT) é um material ferroelétrico que pode ser utilizado em dispositivos piezoelétricos. Entretanto, durante o resfriamento após a sua sinterização, sofre uma deformação devido à transição de fase cúbica para elétrica-tetragonal ferroelétrica, a qual dificulta a produção de corpos densos e livres de defeitos. A adição de impurezas como o La resolve este problema e permite que se obtenha corpos com a resistência mecânica suficiente para seu manuseio, mas causa uma diminuição da temperatura de transição, devido à redução do fator de tetragonalidade, entre outras mudanças importantes. A influência da concentração de lantânio nas propriedades vibracionais e estruturais do material, apesar de importantes, têm sido pouco estudadas. Neste trabalho, cerâmicas de  $(\text{Pb}_{1-x}\text{La}_x)\text{TiO}_3$  com  $0 \leq x \leq 0.3$  foram preparadas por processamento cerâmico convencional e sinterizadas a temperaturas abaixo da usual ( $850^{\circ}\text{C}$  e  $1000^{\circ}\text{C}$ ) e à normal ( $1200^{\circ}\text{C}$ ). Foram feitos espectros Raman em diversas temperaturas. Os resultados mostram que esta é uma técnica útil para determinar a temperatura de transição do material, permitindo que se faça a medida sem a necessidade de tratamento especial, necessário para medidas dielétricas, por exemplo. Foi observada por espectroscopia Raman a progressiva diminuição da frequência do "soft mode" dos vários modos com o aumento da temperatura de sinterização, o que foi associado à incorporação do lantânio no titanato de chumbo, suposição confirmada pela difração de raios-x. A mudança nos espectros Raman e de raios-x na concentração de 27% mostra que é nesta que ocorre a transição de fase a temperatura ambiente.

## Estudo do comportamento da Termoluminescência (TL) do quartzo irradiado com baixas doses de radiação- $\gamma$ .

Tatumi S H\*, Barreto\*\* A M F, Suguio\*\* K, Matsuoka<sup>+</sup>M, Watanabe<sup>+</sup> S e Aya<sup>+</sup>W E F  
\* FATEC-SP, \*\* IGUSP, <sup>+</sup> IFUSP

*Palavras-Chave:* datação, duna, termoluminescência

A termoluminescência de cristais de quartzo extraídos de paleodunas está sendo investigada com o intuito de se obter a geocronologia das deposições das paleodunas (Barreto e Suguio, 1995). A determinação das doses acumuladas nas amostras foi feita segundo os métodos de doses adicionais (Singhvi *et al*, 1982) e o "total bleach-regeneration" (Proszynska, 1983, Debernham, 1983). O crescimento da intensidade do pico TL de 590 K em função de doses crescentes de radiação -  $\gamma$ , foi observado em um intervalo de baixas doses (de 0 a 20 Gy), as amostras utilizadas foram as naturais e as previamente branqueadas com a luz solar. Os crescimentos linear e sub-linear foram observados na grande maioria dos casos (Tatumi *et al*, 1996). As idades (tempo de deposição) de algumas amostras foram calculadas com a determinação das taxas da dose de radiação ambiental anual e os valores encontrados foram os seguintes:  $8,3 \times 10^3$ ;  $7,2 \times 10^3$ ;  $3,8 \times 10^3$  anos; concordando com as idades determinadas pelo método do  $^{14}\text{C}$ .

Barreto A M F e Suguio K, 1995 *Anais V Congresso da Associação Brasileira de Estudos do Quaternário e XI Simpósio de Sedimentologia Costeira*, 32-36.

Singhvi A K, Sharma Y P and Agrawal D P, 1982, *Nature* 295, 313-315.

Proszynska H, 1983 *PACT Journal* 9 539-546.

Debernham N C and Walton A J, 1983 *PACT Journal* 9 531-538.

Tatumi H S, Aya W E F, Matsuoka M, Watanabe S, Barreto A M F e Suguio K, 1996 *Scientific program and abstracts of International Symposium Luminescence and ESR Dating for Archaeology and Quaternary Materials*, 8-10.

(FAPESP)

## FOTOCONDUTIVIDADE EM KCl E KI DOPADOS COM $\text{Yb}^{2+}/\text{CN}^-$

*Luís Humberto da Cunha Andrade, Antônio Carlos Hernandez, Máximo Siu-Li*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, SP

*Palavras-Chave:* fotocondutividade, KCl,  $\text{KI}:\text{Yb}^{2+}:\text{CN}^-$

Amostras de KCl dopadas com  $\text{Yb}^{2+}/\text{CN}^-$  apresentam uma forte emissão, de acordo com a referência [1]. Na expectativa de observar fotocondutividade nessas amostras, devido a que as transições eletrônicas das impurezas se encontram próximas à banda de condução, foi realizado um estudo sistemático desse fenômeno. Realizando os experimentos com as amostras de mesma concentração de dopagem, as quais foram crescidas sob atmosfera inerte pelo método de Czochralski, obtivemos os resultados mostrados a seguir, à temperatura ambiente, à potência de bombeamento aplicada em torno de 80 mW e um campo elétrico aplicado normalizado de 2.7 KV/cm.

$\lambda$ (nm)	Fotocondutividade (pA)	
	KCl: $\text{Yb}^{2+}:\text{CN}^-$	KI: $\text{Yb}^{2+}:\text{CN}^-$
514 Ar <sup>+</sup> laser	0.25	$5.50 \times 10^{-2}$
458 Ar <sup>+</sup> laser	2.2	$1.30 \times 10^3$
337.5-356.4 Kr <sup>+</sup> laser	7.6	$1.10 \times 10^3$

As amostras puras e com um simples dopante apresentaram uma fraca fotocorrente, com exceção do KCl: $\text{Yb}^{2+}$  que apresentou uma alta fotocorrente. A introdução da molécula de  $\text{CN}^-$  na matriz de KCl aumenta a fotocorrente, mas esta é maior nas matrizes de KI que apresenta três ordens de grandezas a mais, como é mostrado na tabela. A fotocorrente aumenta quando aplicamos as MLUV do laser de Kr<sup>+</sup> nas amostras de KCl dopadas, mas nas de KI dopadas o aumento da fotocorrente ocorre quando aplicamos a linha de 458nm do laser de Ar<sup>+</sup>. Assim, sabendo que o KI tem uma banda proibida menor do que o KCl, a probabilidade de induzir fotocorrente é maior no KI do que no KCl.

( Fapesp, Finep, CNPq e Capes)

[1] M. Müller, J.L.Fabris, A.C.Hernandes, M. Siu-Li, *J. of Luminescence* 59, 289 (1994)

## ESTUDO DA INTERAÇÃO DE ÁTOMOS DE HIDROGÊNIO COM IMPUREZAS EM METAIS DE TRANSIÇÃO

*José Mestnik Filho, Artur Wilson Carbonari, Willi Pendl Jr., Rajendra Narain Saxena*  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

**Palavras-Chave:** defeitos, hidretos metálicos, correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada

A interação entre átomos de hidrogênio e impurezas, ambos diluídos em metais e/ou ligas de metais de transição, é investigada pela técnica de correlação angular perturbada de raios gama utilizando núcleos sonda de  $^{181}\text{Ta}$  formados a partir do decaimento  $\beta^-$  do  $^{181}\text{Hf}$ , previamente dissolvido nas matrizes metálicas de Ti, Pd e Rh<sub>3</sub>Zr. É de se esperar que impurezas substitucionais com raios atômicos maiores que os dos átomos da matriz hospedeira, porém de natureza química similar, atraiam átomos de hidrogênio. O mesmo é esperado para impurezas situadas à esquerda, na tabela periódica, em relação aos átomos da matriz<sup>(1)</sup>. Surpreendentemente não foi observada nenhuma interação entre átomos de hidrogênio e átomos de Hf e/ou Ta em temperaturas acima de 77 K em quaisquer das redes metálicas estudadas. Resultados obtidos após absorção de oxigênio pelas redes metálicas, são completamente distintas quando comparadas com o caso da absorção de hidrogênio. São várias as interpretações possíveis para o resultado obtido. 1) A interação entre átomos de hidrogênio e as impurezas é tal que resulta numa mudança desprezível do gradiente de campo elétrico próximo ao átomos de Hf/Ta, hipótese pouco provável uma vez que são observadas mudanças em concentrações elevadas de hidrogênio. 2) O efeito de atração compete com efeitos energeticamente mais favoráveis como a formação de precipitados. Este efeito é difícil de se controlar na prática, porém é minimizado ao se realizar as medidas em função de concentrações variáveis de hidrogênio e com vários tratamentos térmicos diferentes antes das medidas. 3) O perfil da distribuição de cargas ao redor da impureza de Hf/Ta é tal que favorece a aproximação de átomos de hidrogênio na primeira vizinhança mas desfavorece na segunda vizinhança. Esta é uma hipótese muito interessante que estaria de acordo com os resultados obtidos.

(1) A.I. Shirley and C.K. Hall. Acta Metall. 32(1) (1984) 49.

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓTICAS DE GARNETS $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ DOPADOS COM OS ÍONS $\text{Er}^{3+}$ E $\text{Cr}^{3+}$

*Ricardo Costa de Santana, Maria Cristina Terrile, Luís Antônio de Oliveira Nunes e Heitor Cury Basso*

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo  
*Gaston Eduardo Barberis*  
Instituto de Física Gleb Wataghin - Universidade de Campinas

**Palavras-chave:** Garnet, Tetrahédrico, Dodecahédrico.

Monocristais com estrutura "garnet", quando dopados com elementos de transição e/ou terras-raras são, particularmente, utilizados como meios ativos na construção de LASERS de estado sólido. Neste trabalho investigamos as propriedades ópticas do garnet  $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  (CGGG) dopado com íons  $\text{Er}^{3+}$  e duplamente dopado com  $\text{Er}^{3+}$  e  $\text{Cr}^{3+}$ , em diferentes concentrações, através de técnicas de espectroscopia óptica (absorção, luminescência e espectroscopia seletiva de sítios) em diferentes temperaturas. No CGGG os íons  $\text{Er}^{3+}$  substituem, habitualmente, os íons  $\text{Ca}^{2+}$  em sítios com simetria dodecahédrica ( $D_{2d}$ ), enquanto que os íons  $\text{Cr}^{3+}$  substituem íons  $\text{Ga}^{3+}$  em sítios tetrahédricos ( $T_d$ )<sup>(1)</sup>. Em reuniões anteriores foram apresentados estudos destes garnets através da técnica de RPE com a qual foi descoberta a existência de mais de um sítio de diferente simetria ocupado pelo íon  $\text{Er}^{3+}$ , e foi calculado o fator-g para este mesmo íon<sup>(2)</sup>. Espectros de fluorescência foram obtidos para as transições  $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  ( $\lambda \approx 550\text{nm}$ ),  $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$  ( $\lambda \approx 858\text{nm}$ ) e  $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  ( $\lambda \approx 660\text{nm}$ ) a partir dos quais determinamos as estruturas dos estados fundamental,  $^4I_{15/2}$ , e primeiro estado excitado  $^4I_{13/2}$  do íon érbio. A dependência da fluorescência correspondente à transição  $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  também é analisada. Determinamos, então, a partir das medidas de fluorescência os valores dos parâmetros de campo cristalino  $B_0^2, B_4^0, B_4^4, B_6^0, B_6^4$  e o fator-g para o íon  $\text{Er}^{3+}$  em sítio com simetria  $D_{2d}$ . Das medidas de absorção constatamos, mais uma vez, a existência de mais do que um sítio de diferente simetria ocupados pelos íons  $\text{Er}^{3+}$ . Utilizaremos a técnica de espectroscopia seletiva de sítios para identificar quais transições observadas correspondem aos diferentes sítios.

<sup>(1)</sup>Y. Gao e col. J. Phys. Cond. Matter, vol.4, 7307 (1992). <sup>(2)</sup>J. L. Moraes e col. Sol. Stat. Comm. vol.95(A), 251 (1995).

## GRADIENTES DE CAMPO ELÉTRICO NO $^{111}\text{Cd}$ EM ÓXIDOS DELAFOSSITE $\text{ABO}_2$ (A=Ag, Cu; B=Al, Cr, Fe, In, Nd, Y)

Roberta Nunes Attili<sup>1</sup>, Michael Uhrmacher<sup>2</sup>, Klaus-Peter Lieb<sup>2</sup>, Mamoru Mekata<sup>3</sup>, Artur Wilson Carbonari<sup>1</sup> e Rajendra Narain Saxena<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

<sup>2</sup> II. Physikalisches Institut, Universität Göttingen, Germany

<sup>3</sup> Department of Applied Physics, Fukui University, Japan

**Palavras-Chave:** Correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada, Óxidos Delafossite, Modelo de cargas pontuais

Os gradientes de campo elétrico (GCEs) no sítio do  $^{111}\text{In}(\text{EC})^{111}\text{Cd}$  foram medidos para vários óxidos da família Delafossite  $\text{A}^+\text{B}^3\text{O}_2$  [ $\text{Ag}(\text{Cr}, \text{In})\text{O}_2$  e  $\text{Cu}(\text{Al}, \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Nd}, \text{Y})\text{O}_2$ ] via correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada (CAP). A impureza radioativa era introduzida nas amostras via implantação iônica, e em seguida as mesmas eram tratadas termicamente para eliminar danos de radiação. Para a maioria dos compostos as medidas de CAP foram realizadas no intervalo 14-1073 K e pelo menos um gradiente de campo elétrico com simetria axial foi encontrado em cada caso. Apenas uma fraca dependência dos GCEs com a temperatura das medidas foi observada para cada material. Devido ao fato desta família de óxidos ser ternária e apresentar dois sítios de cátions não equivalentes na estrutura cristalina, dúvidas surgiram quanto à localização da ponta de prova. Entretanto vários argumentos químicos e físicos, bem como uma comparação com os resultados obtidos para os materiais  $\text{AgCrO}_2$ ,  $\text{AgInO}_2$  e  $\text{CuFeO}_2$  utilizando a ponta de prova  $^{111}\text{Ag}/^{111}\text{Cd}$ , indicam o sítio B para o  $^{111}\text{In}/^{111}\text{Cd}$ . Os GCEs experimentais foram, então, comparados com aqueles calculados por um modelo de cargas pontuais, resultando em uma sistemática de gradientes de campo elétrico em função do comprimento da ligação Cd-O, que concorda com aquela obtida para outras famílias de óxidos na literatura.

(CNPq, FAPESP e Deutsche Forschungsgemeinschaft)

## PROPRIEDADES TERMOLUMINESCENTES DO $\text{CaF}_2$ DOPADO COM $\text{Al}^{3+}$ E $\text{La}^{3+}$

Adeilson Pessoa de Melo<sup>1</sup>, José Fernandes de Lima<sup>1</sup>, Ana Maria G. Figueredo<sup>2</sup>, Alan V. Chadwick<sup>3</sup> e Mário Ernesto Giroldo Valério<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Depto de Física, UFS, CEP 49.100-000, S. Cristovão-SE, Brasil

<sup>2</sup>Div. de Radioquímica, IPEN-CNEN/SP, CEP 05422-970, S. Paulo, Brasil

<sup>3</sup>Centre for Materials Research, Chemical Lab., Univ. of Kent, Canterbury, CT2 7NH U.K.

**Palavras-Chave:** termoluminescência,  $\text{CaF}_2$ , alumínio

Embora o  $\text{CaF}_2$  seja um material extensamente estudado, existem poucos trabalhos na literatura que tratem da emissão termoluminescente (TL) com dopantes diferentes dos íons metálicos da família das terras raras, ítrio e manganês. Neste trabalho estudamos as características da emissão TL do  $\text{CaF}_2$  dopado com  $\text{Al}^{3+}$  comparadas com a TL de amostras puras de  $\text{CaF}_2$  e dopadas com  $\text{La}^{3+}$ . As amostras foram crescidas pelo método de Stockbarger com concentração nominal de  $\text{Al}^{3+}$  e  $\text{La}^{3+}$  de 0.1 mol%. Utilizamos o método por ativação com nêutrons para analisar os cristais crescidos. Após a pulverização e seleção granulométrica as amostras foram divididas em 5 grupos: i) amostras sem nenhum tratamento; ii) amostras com dose de 200Gy do  $\text{Co}^{60}$ ; iii) amostras tratadas a 600°C por 10 min seguidas de um rápido resfriamento expostas a dose de 200Gy do  $\text{Co}^{60}$ ; iv) e v) amostras submetidas ao mesmo tratamento térmico e expostas, respectivamente, a luz visível e UV por 1h. Os resultados mostraram que: i) existem 8 picos TL diferentes nas amostras em torno de: 55, 80, 100, 125, 160, 185, 200 e 240°C; ii) a intensidade relativa desses picos varia de amostra para amostra. Para uma mesma amostra as intensidades dependem das combinações do tratamento térmico, irradiação com gama, UV ou luz visível; iii) o  $\text{Al}^{3+}$  induz no  $\text{CaF}_2$ , quando exposto aos raios gama, um sinal TL com picos 10 vezes mais intensos que os correspondentes picos das amostras dopadas com  $\text{La}^{3+}$ ; iv) no grupo 4, as três amostras apresentam áreas similares da curva de emissão TL, entretanto com intensidades TL relativas dos picos individuais muito diferentes e v) as amostras puras tem uma maior sensibilidade a luz UV as outras dopadas. As energias de ativação dos picos TL, bem como, outros parâmetros de ordem cinética foram obtidos por diferentes métodos.

## ESTUDO DO DESLOCAMENTO ISOMÉRICO PARA UMA IMPUREZA SUBSTITUCIONAL DE Fe EM HOSPEDEIROS METÁLICOS

*Luis Alberto Terrazos Javier - Sonia Frota Pessôa*  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* Efeito Mössbauer, Estrutura eletrônica

Neste trabalho estudamos o comportamento do deslocamento isomérico de uma impureza substitucional de Fe em hospedeiros metálicos. Determinamos a estrutura eletrônica em torno de uma impureza substitucional de Fe nos metais V, Cr, Rh, Ni, Cu, Ag e Al. Para realizar estes cálculos utilizamos um método de primeiros princípios dentro da aproximação de densidade local, o RS-LMTO-ASA<sup>(1)</sup> ("Real-Space-Linear Muffin-Tin-Orbital-Atomic Sphere Approximation"). Calculamos o deslocamento isomérico (IS) da impureza de Fe para esses sistemas. Os resultados encontrados para o deslocamento isomérico estão em boa concordância com os dados experimentais, quando existentes. Utilizando esses resultados e resultados anteriores de nosso grupo<sup>(2)</sup> para uma impureza substitucional de Fe em Pd, Zr, Y, Sc, Ti, Nb, Mo, Tc, Ru, realizamos um estudo sistemático do comportamento do deslocamento isomérico do Fe em hospedeiros da linha 3d e 4d da tabela periódica. Mostramos que as tendências do IS são dominadas pela contribuição de valência e podem ser entendidas em termos do volume ocupado pelo Fe no hospedeiro. No entanto os hospedeiros no sítio à esquerda do Fe se comportam de forma distinta daqueles à direita do Fe na tabela periódica. Para tentar entender esse comportamento, observamos que os valores de transferência de carga total do hospedeiro na impureza substitucional de Fe e os valores de transferência de carga na banda *s* da impureza como função do raio de "Wigner-Seitz" (WS) tem comportamento semelhantes.

(1) Sonia Frota Pessôa, *Phys. Rev. B* 46, 14570 (1992)

(2) S. Frota Pessôa, L. A. de Mello, H. M. Petrilli and A. B. Klautau, *Phys. Rev. Lett.* 71, 4206 (1993)

(CAPES e FAPESP)

## ESTUDO TEÓRICO SOBRE IMPUREZAS DE C OU N EM Fe fcc.

*Renata Nascimento Nogueira e Helena Maria Petrilli*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo - SP

*Palavras-chave:* austenitas, deslocamento isomérico, gradiente de campo elétrico

Há um grande número de estudos experimentais sobre as ligas de Fe-C e Fe-N, devido a seu interesse para a metalurgia. Sabe-se que nestas ligas os átomos de C e N ocupam posições intersticiais sendo que, quando o sistema se encontra na fase austenítica, ou seja, num arranjo fcc dos átomos de Fe, elas se alojam nos interstícios tetraédricos. No entanto, encontram-se na literatura diferentes propostas para a deconvolução do espectro Mössbauer para estes sistemas, sugerindo diferentes distribuições das impurezas. Isso ilustra o fato de as características microscópicas destas ligas serem ainda pouco conhecidas, logo, é interessante realizar um estudo teórico das propriedades locais induzidas nos átomos de Fe pela presença destas impurezas, e avaliar o alcance da mesma. Utilizamos o RS-LMTO-ASA (Real Space - Linear Muffin-Tin - Atomic Sphere Approximation) para estudar os sistemas com uma única impureza de C ou N em hospedeiro Fe fcc. Este método é autoconsistente, de primeiros princípios dentro da aproximação de densidade local, utiliza em seu bojo o método de recorrência, e é bastante adequado para o tratamento de defeitos locais. Neste trabalho, calculamos as densidades de estados locais, o deslocamento isomérico e o gradiente de campo elétrico nos sítios de Fe das vizinhanças da impureza e os comparamos com os valores para o Fe fcc puro, calculado pelo o mesmo método, e avaliamos a influência exercida. Além disso, também comparamos estes valores com aqueles obtidos para o espectro Mössbauer destas ligas.

(FAPESP)

## ESTUDO DE FLUORESCÊNCIA COM RESOLUÇÃO DE NANOSEGUNDOS DE VIDROS ALUMINOBORATOS DOPADOS COM $\text{Cr}^{3+}$ E $\text{Cu}^+$

*Luzia Saeko Kanashiro, Walter Maigon Pontuschka*  
Instituto de Física - USP

*Palavras-chave:* vidro, fluorescência, transferência de energia

Investigamos a ocorrência de transferência de energia envolvendo íons de elementos de transição em matrizes vítreas inorgânicas utilizando vidros aluminoboratos de bário compostos de  $20\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $50\text{B}_2\text{O}_3$  e  $30\text{BaO}$  (mol%) contendo 0.1 at% de  $\text{Cr}^{3+}$ , 0.1 at% de  $\text{Cu}^+$  e 0.1 $\text{Cr}^{3+}$  + 0.1 $\text{Cu}^+$  (at%), fundidos a  $1300^\circ\text{C}$ . Além da espectroscopia convencional de absorção óptica nas regiões visível, ultravioleta e infravermelho, efetuamos medidas à temperatura ambiente de decaimento temporal com resolução em nanosegundos de emissões fluorescentes nos comprimentos de onda correspondentes aos picos das bandas de emissão observadas no espectro previamente obtido em fluorímetro usual. Descrevemos com certo detalhe a técnica de espectrofluorimetria temporal e relatamos os testes realizados com o equipamento (SP70 - Applied Photophysics) utilizando soluções e vidros com tempos de vida conhecidos, os quais apresentaram boa concordância mostrando a confiabilidade do instrumento. Os resultados de fluorescência mostram uma intensificação na luminescência do íon cobre quando este é colocado na presença do íon cromo na mesma matriz vítrea. As transições foram identificadas e as propriedades espectroscópicas desses íons em vidros inorgânicos foram estudadas. Com base nos resultados obtidos um modelo de interação iônica baseado na transferência de energia é sugerido e discutido. (Apoio: CNPq / FINEP)

## ESPECTROSCOPIA DE ÍONS $\text{Nd}^{3+}$ NA REDE $\text{CsGd}_2\text{F}_7$

*C.L. Barros, R.B. Barthem*  
Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro - R.J.

*N.M. Khaidukov*  
Institute of General and Inorganic Chemistry, Moscou - Rússia.

*Palavras-Chave:* espectroscopia, neodímio,  $\text{CsGd}_2\text{F}_7$ .

Estudos em espectroscopia óptica do cristal fluoreto  $\text{CsGd}_2\text{F}_7$ , dopado com íons  $\text{Nd}^{3+}$ , foram realizados com o objetivo de se determinar as propriedades dos sítios luminescentes. Estes estudos foram feitos a baixas temperaturas em cristais com concentrações entre 0,3% e 100% de  $\text{Nd}^{3+}$  em substituição ao  $\text{Gd}^{3+}$ .

Os resultados experimentais discutidos nesse trabalho evidenciam a presença de dois centros emissores. A identificação destes centros foi feita a partir da análise dos espectros das transições  $^4I_{9/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ ,  $^4I_{9/2} \rightarrow ^4G_{5/2}$  e  $^4I_{9/2} \rightarrow ^4F_{3/2}$  do  $\text{Nd}^{3+}$  nesta rede hospedeira. Novos estudos estão sendo realizados com o intuito de se caracterizar estes centros e de se determinar os processos de transferência de energia.

### Referências:

- 1) A.A. Kaminskii, N.M. Khaidukov, M.F. Joubert, G. Boulon, *Phys. Stat. Sol. (A)* 141 (1994) K55.
- 2) C. Barhou e R.B. Barthem, *J. Lumin.* 46(1990) 9-15.
- 3) H.N. Bordallo, R.B. Barthem e C. Barhou, *Solid State Communication* 92 (1994) 721-723.

*Apoio: Fundação José Bonifácio, CNPq.*

## MECANISMOS DE POLARIZAÇÃO NO BaLiF<sub>3</sub> COM Pb<sup>2+</sup> E Ni<sup>2+</sup>

Ana Gardênia S. Mangueira\*, Jackson A. de Oliveira\*, Mário Ernesto G. Valerio\*, José F. de Lima\*, Lucia Prado+, Sônia L. Baldochi+, Nilson D. Vieira Jr+., Spero P. Morato+

\*Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe

+Departamento de Óptica Aplicada, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares

**Palavras Chave:** BaLiF<sub>3</sub>, TSDC, defeitos intrínsecos

O BaLiF<sub>3</sub> é um cristal iônico de estrutura conhecida como perovskita invertida com os cátions Ba<sup>2+</sup> e o Li<sup>+</sup> ocupando sítios de simetria O<sub>h</sub> e o Li<sup>+</sup> ocupando D<sub>4h</sub>. O conhecimento da estrutura dos defeitos intrínsecos e os gerados por impurezas neste material é de grande importância no que se refere a aplicação em lasers e dispositivos ópticos. Trabalhos recentes <sup>[1,2]</sup> demonstraram a possibilidade de dissolver íons divalentes na estrutura do BaLiF<sub>3</sub>. Neste trabalho estamos estudando a influência destes íons relacionada com o mecanismo de despolarização do BaLiF<sub>3</sub>. Para isto estamos utilizando a técnica de TSDC que consiste em medir, segundo um programa térmico escolhido, a corrente gerada pela despolarização de um sólido dielétrico inserido entre dois eletrodos. Na TSDC, polariza-se a amostra a uma certa temperatura seguida de um resfriamento congelando esta polarização a temperaturas próximas do N<sub>2</sub> líquido. A despolarização é observada durante o reaquecimento da amostra. As amostras foram crescidas pela técnica de Czochralski em atmosfera dinâmica hidrofúorinante. Estamos estudando amostras de BaLiF<sub>3</sub> pura e dopadas com Pb<sup>2+</sup> (em duas concentrações 0,3 e 0,9 mol%) e com Ni<sup>2+</sup> (concentração de 1,0 mol%) aplicando-se tensões de polarização de 100 a 1000V num intervalo de temperatura de 90 a 350K. A taxa de aquecimento utilizada na fase de despolarização foi de 2K/min. A quantidade, posição e intensidade dos picos depende das condições de polarização da amostra e da quantidade e do tipo do dopante. Estamos fazendo análises no intuito de determinar quais são os parâmetros que conseguem modificar as características dos picos de TSDC e determinar a natureza dos fenômenos microscópicos das relaxações principais.

[1] L Prado-N, D Vieira Júnior, S L Baldochi, S P Morato. *Sol. State Comm.* 87, 41-46, (1993)

[2] E Martins, N D Vieira Júnior, S L Baldochi, S P Morato, J Y Gesland. *J Lumin* 62, 281-289 (1994)

## EMISSÃO TERMOLUMINESCENTE DO CaCO<sub>3</sub>:Pb<sup>2+</sup>

Débora de Gois Santos, Mário Ernesto Giroldo Valerio e José Fernandes de Lima  
Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, Campus Universitário 49.100-000, São Cristóvão-SE, Brasil

**Palavras-chave:** termoluminescência, calcita, defeitos.

Estudos realizados por Medlin 1959 verificaram que a intensidade termoluminescente da calcita é afetada pela presença de impurezas. Os íons Mn<sup>2+</sup> e Pb<sup>2+</sup> são conhecidos como ativadores da emissão TL enquanto que as presenças de Fe<sup>3+</sup>, Co<sup>2+</sup> e Ni<sup>2+</sup> funcionam como inibidoras. No presente trabalho estudamos a emissão TL do CaCO<sub>3</sub>:Pb<sup>2+</sup> submetido a diferentes tratamentos térmicos e de radiação. As amostras em forma de microcristais foram obtidas adicionando-se lentamente uma solução de (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> a uma solução de CaCl<sub>2</sub> contendo pequenas quantidades de PbCl<sub>2</sub>. As curvas de emissão TL foram registradas no intervalo de temperatura de 30°C até 300°C com uma taxa de aquecimento de 2,0°C/s. A curva de emissão da amostra virgem, não submetida a nenhum tratamento, apresentou um único pico, de intensidade muito baixa, na região de 220°C (pico B). A irradiação com raios gama provocou o crescimento do pico de 220°C e o aparecimento de um novo pico na região de 90 a 110°C (pico A). A intensidade dos dois picos cresce com a quantidade de Pb<sup>2+</sup> até a 2% em volume. Os tratamentos térmicos de 400°C/1h e 550°C/1h provocaram o aumento de intensidade do pico A e o deslocamento de pico B para temperaturas maiores. Esses resultados indicam que a determinação da idade de formações geológicas através da termoluminescência da calcita pode ser afetada pela própria história geológica da formação em estudo.

## GENERAL ORDER KINETICS AND ITS VALIDITY IN THERMOLUMINESCENCE

*Chinta Mani Sunta, Walter Elias Faria Aya and Shigueo Watanabe*  
Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo  
São Paulo

*Palavra-Chave:* thermoluminescence, kinetic, dose

The initial theoretical treatments of a thermoluminescence glow curve were given in terms of kinetic orders 1 or 2. Subsequently a model called general order kinetics was introduced which includes fractional values of kinetic order. Glow curves have been given also with kinetic order values less than 1 and greater than 2. Generally the kinetic order value is expected to take into account the relative probabilities of retrapping and recombination transitions of electrons and holes. In this paper it is shown that a fixed kinetic order value is in general incapable of describing the behavior of the glow curves originating from a defect centre with given values of activation energy and frequency factor. Using the generalized approach; it is shown that the shape factor of the glow curve which is taken as the basis for determining the kinetic order value changes with the dose given to the sample. Numerical calculations are carried out to show the behavior of the glow curves at different dose values. The characteristics studied are the temperature of maxima and the shape factor of the glow curve. It is found that the shape factor changes with dose. Thus one may get one value of kinetic order at one dose and another value at another dose. The exception to this general behavior is when kinetic order is either 1 or 2. Thus the kinetic order values other than 1 and 2 seem to be of dubious value in the describing the behavior of the glow curves in thermoluminescence.

(FAPESP)  
(CNPq)

## ESPECTROSCÓPIA MAGNETO-ÓTICA E RPE EM CR(III)[L-HISTIDINA]

*H.C. BASSO; R.C. SANTANA; R.A. CARVALHO; M.C. TERRILE; R.CALVO\**

DFI - IFSC- USP  
\*CONICET-UNL - SANTA FE - ARGENTINA

Monocristais do composto metal-aminoácido  $\text{Cr}^{3+}(\text{L-histidina})_2\text{NO}_3$  foram crescidos por solução aquosa. Neste trabalho, nós estudamos os espectros de absorção ( com luz polarizada) e emissão desses monocristais sob campo magnético de até 5 T e a 1.8 K. De forma geral, o espectro apresenta duas bandas largas e fortes, referentes às transições  ${}^4A_2 - {}^4T_2$  e  ${}^4A_2 - {}^4T_1$  do cromo. Além disso, duas linhas estreitas, correspondentes às transições proibidas por spin  ${}^4A_2 - {}^2E$  e  ${}^4A_2 - {}^2T_1$ , também foram observadas. Essas transições são típicas de cromo trivalente em um sítio de simetria octaédrica ( $O_h$ ), o que é compatível com a posição do íon na estrutura cristalina do composto. Porém, uma série de linhas adicionais, devidas a modos vibrônicos, também são observadas. Em particular, o estudo detalhado da transição  ${}^4A_2 - {}^2E$  mostra um deslocamento interessante da posição do espectro de emissão em relação ao de absorção. Esse deslocamento não parece ser devido à relaxação de rede (Franck-Condon), mas sim aos modos vibrônicos que permitiriam a transição. Esse ponto será discutido com mais detalhes no trabalho. Essa mesma transição teve seu comportamento sob campo magnético estudado, no limite de resolução de nosso sistema. Disto foram inferidos os valores do fator giromagnético do estado excitado e do fundamental.

Medidas mais precisas do estado fundamental foram feitas com medidas de RPE à temperatura ambiente, com monocristais. Os resultados dessas medidas serão também apresentados e discutidos.

FAPESP-CNPq

## TERMOLUMINESCÊNCIAS DE TOPÁZIOS DE DIFERENTES ORIGENS

*Divanizia do Nascimento Souza, José Fernandes de Lima e Mário Ernesto Giroldo Valério*  
Departamento de Física - Universidade Federal de Sergipe

*Palavras-Chave:* topázio, termoluminescência, energia

Neste trabalho continuamos investigando as propriedades termoluminescentes do topázio comparando amostras de diferentes origens e colorações. Seis amostras provenientes de Minas Gerais foram analisadas como segue: 1 - Topázio transparente, de Acari; 2 - transparente de Santo Antônio do Jacinto; 3 - cinza de Santo Antônio do Jacinto; 4 - azul de Ouro Preto; 5 - amarelo de Ouro Preto; e 6 - laranja de Dom Bosco. As amostras foram trituradas e apenas os grãos entre 0,075 e 0,150mm foram utilizados. As amostras foram divididas em grupos de acordo com os tratamentos térmicos, que variaram de 300 a 800°C, e formas de irradiação ou iluminação, com raios gama, luz ultravioleta e luz visível. Os resultados revelaram que: i) as curvas de emissões dos topázios exibem 6 picos de termoluminescência com temperaturas de máximo em torno de 80, 150, 170, 230, 280 e 330°C (picos de 1 a 6); ii) as intensidades dos picos variam de acordo com a amostra, temperatura de tratamento térmico e comprimento de onda da pré-irradiação (luz visível, UV ou raios gama do  $^{60}\text{Co}$ ); iii) os picos das amostras incolores (topázios 1 e 2) são sempre mais intensos que os picos das amostras coloridas; iv) apenas tratamentos térmicos acima de 400°C eliminam os picos de 270 e 330°. v) nas amostras tratadas observa-se que o pico 3 (170°) decai mais rapidamente que o pico 2 (140°); vi) a luz visível influencia pouco as curvas de emissão enquanto a luz UV produz picos 2 e 3 intensos. As energias de ativação dos picos TL bem como os parâmetros cinéticos foram obtidos por diferentes métodos. Os picos 2, 4, e 5 são governados por um modelo de segunda ordem enquanto o pico 3 é devido a uma distribuição contínua de picos.

## MEDIDAS DE ABSORÇÃO ÓPTICA E CDTE EM CRISTAIS DE $\text{KCl}:\text{InCl}_2$

*Rosa Maria Fernandes Scalvi<sup>1,2</sup>, Máximo Siu Li<sup>2</sup>, Elisabete A. Andrello Rubo<sup>1,2</sup>,  
Lígia de Oliveira<sup>1</sup>, Antônio Carlos Hernandez<sup>2</sup>*

1- Dep. de Física - UNESP- campus de Bauru, CP 473, Bauru-SP 17033-360

2- F.C.M. - Instituto de Física de São Carlos - USP, CP 369, São Carlos SP 13560-970

*Palavras-chave:*  $\text{KCl}:\text{In}$ , halogenetos alcalinos, propriedades eletro-ópticas.

A presença de impurezas em cristais de halogenetos alcalinos provoca o surgimento de novas propriedades, as quais dependem do tipo de impurezas. A caracterização destes materiais torna-se importante para sua utilização como dispositivos, por exemplo: meio ativo para laser, termistores criogênicos, detectores de luz, etc. Neste trabalho apresentamos os resultados de medidas de absorção óptica em cristais de  $\text{KCl}:\text{InCl}_2$ , realizados à temperatura ambiente, e medidas de Corrente de Despolarização Termicamente Estimulada (CDTE), obtidas de 10K a 292 K. Os espectros de absorção mostram o aparecimento de uma banda em torno de 228 nm e outra de menor intensidade em torno de 250 nm que está sob investigação. As amostras foram submetidas a tratamentos térmicos por 7, 15 e 30 minutos à 550°C. As medidas de CDTE foram realizadas com taxa de aquecimento 0,1 Ks<sup>-1</sup> e um campo de polarização de 2,2 kV/cm. Essas medidas revelam o aparecimento de uma banda larga em torno de 136 K. Os resultados de absorção óptica nos levam a acreditar na presença de  $\text{In}^+$ , atribuídos ao aparecimento da banda em 228 nm e a pares de  $\text{In}^+$ , atribuídos a banda em 250 nm [1]. Entretanto, como obtivemos nas medidas de CDTE uma banda de relaxação dipolar, abrem-se as possibilidades de ter  $\text{In}^+$  fora de centro e a presença de  $\text{In}^{+2}$  na rede de KCl. A fim de verificar qual o estado de carga da impureza presente na amostra devemos ainda realizar medidas de absorção óptica em função da temperatura e utilizar a técnica de ressonância eletrônica paramagnética, EPR, o que permitiria esclarecer melhor nossos resultados. Paralelamente ao estudo de impurezas de In em cristais de KCl foram realizadas medidas de absorção óptica em filmes de KCl dopados com In, as quais são apresentadas também no XIX ENFMC.

[1] - T.Tsuboi e P.W.M. Jacobs, J. Phys. Chem. Solids, 52 (1991),69-80

## COMPUTER MODELLING OF DIVALENT DOPANTS IN BaLiF<sub>3</sub>

Mário Ernesto Giroldo Valerio\*, José Fernandes de Lima\* and Robert Adam Jackson†

\* Depto. de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49.100-000, S. Cristovão-SE, Brasil

† Department of Chemistry, Keele University, Keele, Staffs ST5 5BG, UK

*Key words:* computer simulation, BaLiF<sub>3</sub>, divalent cations

BaLiF<sub>3</sub>, when doped with specific divalent cations, shows interesting optical behaviour which may lead to potential applications in laser devices[1]. Computer modelling methods, based on lattice energy and defect energy minimisation, have been used to study the properties of this material. Computer modelling methods are now well-established in the study of inorganic materials. They depend on the availability of a reliable interatomic potential for the material of interest. A recent application presented at EURODIM94 is given in reference [2]. In the case of BaLiF<sub>3</sub>, a potential has been fitted to the crystal structure, elastic and dielectric constants of the material, which has then been used in a study of defect properties using Mott-Littleton methodology [3]. First the intrinsic defects have been studied, and conclusions drawn about the expected form of intrinsic disorder in the material. Secondly, dopant cations have been introduced into the structure. The ions of greatest technological interest are Pb<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup> and Co<sup>2+</sup>. As well as calculating the substitution energy of each ion at the Ba<sup>2+</sup> and Li<sup>+</sup> sites, solution energies can be calculated which take into account the total energetics of the doping process. The results clearly indicate that: i) the main intrinsic defect in BaLiF<sub>3</sub> is the pseudo-Schottky Li-F pair, and, ii) the divalent cations substitute for the Li<sup>+</sup> ions and the charge compensation is mainly provided by F<sup>-</sup> interstitials.

[1] L Prado, N D Vieria Junior, S L Baldochi, S P Morato, *Sol.State.Comm.* **87**, 41-46 (1993)

[2] R A Jackson, J E Huntington and R G J Ball, *Rad.Eff.Def.Sol.* **134**, 161-164 (1995)

[3] C R A Catlow, *J.Chem.Soc.Far.Trans II* **85**, 335-340 (1989)

## LAMB-WAVES IN CERAMIC-POLIMER ARRAYS

*Negreira, C.A.<sup>1</sup> - Gómez, H.<sup>1</sup> - Aulet, A.<sup>1</sup> - Eiras, J.A.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo  
URUGUAY

<sup>2</sup>Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas, Dpto. Física, Univ. Federal de Sao Carlos  
BRASIL

*Keywords: ultrasonic imaging, piezocomposite, Lamb-waves*

1-3 composite transducer materials shaped by PZT piezoelectric ceramic rod array embedded in an epoxy-type resin are increasingly used for clinical diagnosis in medical ultrasonic imaging applications and NDT. These materials allow an excellent acoustical impedance matching with the radiated media without relevant sensitivity losses.

We present actual analysis results for one of the major difficulties that this sensor type presents, namely the spurious lateral vibration modes which transversally propagate across the array and obstruct the sensor to vibrate like a piston as desirable. We carry out the theoretical and experimental study of the existence of Lamb-waves. The existence of a second vibration mode which propagates at less speed than of the longitudinal one is detected by acoustical means. The Lamb's vibration mode depends on the thickness of the sample which determine the main vibration frequency in thickness mode (in our case 1-5 Mhz), as well as on the periodicity of the given ceramic rod matrix, for different samples prepared in our laboratory.

(This work is supported by Conicyt-BID, PEdeCiBa and CNPqD)

## CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DE FIBRAS DE CELULOSE USADAS NA CONFEÇÃO DE DIAFRAGMAS DE ALTO-FALANTES

*Cristiane S. Hernandez\*, Leide P. Cavalcanti\*\**

\*Grupo de Pesquisa e Desenvolvimento - NOVIK S.A Ind. e Com.

\*\*Depto Estado Sólido, Instituto de Física 'Gleb Wataghin', UNICAMP

*Palavras-Chave:* celulose, alto-falante, difração de raios-x

As fibras de celulose são um dos materiais mais utilizados na fabricação de diafragmas de alto-falantes. A função do diafragma no alto falante é realizar o acoplamento mecanoacústico: transformar energia mecânica em energia acústica. Esta transformação se dá através das vibrações (regime senoidal) do diafragma que produz ondas de pressão sonora com a mesma frequência. Para uma dada potência elétrica e acima de uma certa frequência, característica de cada diafragma, formam-se modos vibracionais no diafragma com frequência superior a da força motriz. As frequências desses modos dependem das propriedades mecânicas do material, que estão relacionadas com suas características estruturais. O objetivo deste trabalho é relacionar as propriedades acústicas dos materiais que compõem o diafragma às suas características estruturais. Foram analisadas fibras de celulose dos seguintes materiais: algodão, sulfite branqueada (pinus), kraft branqueado (pinus), kraft não branqueado (pinus), eucalipto e outros. Foi possível comparar grau de cristalinidade, tamanho de grão cristalino, orientação preferencial e composição das fibras utilizando técnicas de difração de raios-x. Foram realizadas também medidas acústicas em diafragmas produzidos a partir destes materiais. Foi confeccionado um mesmo padrão de diafragma (forma e processo de fabricação) para cada material estudado. Utilizando-se também um mesmo motor eletromagnético, foram realizadas medições do nível de pressão sonora para várias frequências aplicadas (faixa audível). Medidas preliminares indicaram que diafragmas confeccionados com uma composição maior de kraft respondem melhor em baixa frequência. Já diafragmas confeccionados com maior quantidade de sulfite e algodão (que têm maior grau de cristalinidade) apresentaram melhor resposta em médias e altas frequências.

(NOVIK / CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS DE CONSTRUÇÃO POR MÉTODOS FOTOTÉRMICOS.

*Manoel Marcos Freire d'Aguiar Neto, Ossamu Nakamura.*  
Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia.

*Palavras-Chave:* fotoacústica, difusividade térmica, efusividade.

Materiais de construção em países tropicais devem atender a duas condições principais: ter boa isolamento térmica em presença de alta umidade atmosférica e ser de baixo custo sem que isto implique numa ameaça à estabilidade mecânica da construção. A argamassa armada, uma mistura de cimento, areia e cascalho, tem custo bastante reduzido enquanto que a estabilidade mecânica não muda significativamente. Contudo, as propriedades térmicas parecem ser fortemente dependentes da densidade, da porosidade e naturalmente, da quantidade de água contida na mistura. O desempenho térmico da argamassa, que influencia o nível de conforto e o custo da construção, vem sendo elucidado através da investigação das suas características termofísicas em função dos diferentes parâmetros do material, e da determinação dos valores da difusividade térmica e da efusividade, usando técnicas fotoacústicas e fototérmicas combinadas.

As medidas estão sendo feitas com uma célula fotoacústica e com radiometria infra-vermelha, em temperatura ambiente e em função da frequência de modulação da radiação incidente (laser de Argônio ou lâmpada de Xenônio) nas amostras. Para se estabelecer um modelo para o material seco, as amostras foram aquecidas a 400K durante 24 hs. Para o estudo da influência do gás e da água eventualmente contidos no material, as amostras foram expostas ao contato com outros gases como Argônio e Hélio; em seguida, após serem desgaseificadas a altas temperaturas, foram expostas ao ar com variados graus de umidade por períodos diferentes de tempo.

Os dados experimentais obtidos até o momento, indicam que o sinal fotoacústico é fortemente dependente da umidade do material, a difusividade térmica decresce com o aumento da umidade. Em geral, a caracterização quantitativa empírica da umidade contida no material é possível por medidas fototérmicas e o processo de secagem e a dinâmica da propagação da umidade pode ser monitorado por ondas térmicas. Radiometria infra vermelha será usada para a detecção da umidade e de fendas na argamassa, em função da profundidade na amostra.

## ANÁLISE ESPECTROSCÓPICA DO POLIPIRROL CONDUTOR.

*Antonio Carlos Rodrigues da Costa*  
*Antonio Fernandes Siqueira*

Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará  
Caixa Postal 6030 - Campus do Pici  
CEP 60451-970 Fortaleza Ceará Brasil  
*Ossamu Nakamura*

Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia  
Rua Caetano Moura 123 - Campus da Federação  
CEP 7100-000 Salvador Bahia Brasil

*Palavras-chave:* Polímeros condutores; Espectroscopia; Fotoacústica.

Através do uso de espectroscopia fotoacústica é analisada a estrutura de transições interbandas do polipirrol condutor. Por ser constituído de material opticamente espesso e com superfície não refletora, o polipirrol condutor apresenta condições excelentes para o uso da espectroscopia fotoacústica no estudo de suas propriedades de absorção óptica, o que seria impossível de ser realizado com técnicas ópticas convencionais de transmissão ou reflexão de luz. O espectro fotoacústico foi obtido usando-se uma varredura em comprimento de onda da luz incidente no intervalo de 200 a 900 nm, emitida por uma lâmpada de Xe de alta pressão. As amostras utilizadas foram obtidas por deposição eletroquímica a partir de solução de pirrol diluído em ácido p-tolueno sulfônico 0.08 M. As amostras do polipirrol usadas neste trabalho tinham espessuras que variavam entre 50 e 150  $\mu\text{m}$ . O experimento foi realizado com luz modulada em frequência de 25Hz e apresenta excelente qualidade de definição. Observou-se uma larga banda de absorção que se estende para a região do infravermelho. A largura desta banda, contudo não foi determinada sendo por isto motivo de futuras investigações. Resultados preliminares apresentam um limiar de estrutura de bandas típica de semiconductor de gap direto.

## DIFUSION ULTRASONORA POR UN MEDIO PERIODICO

Alicia Arzúa, Carlos Negreira.

Lab. Acústica Ultrasonora, Instituto de Física , Facultad de Ciencias, UdelaR.  
Montevideo, URUGUAY

*Palabras claves: difusión ultrasonora, correlación espacial, medio con fibras.*

Actualmente el análisis de la interacción de una onda ultrasonora con un medio heterogéneo de dos fases tiene amplia aplicación en la caracterización de materiales, como por ejemplo los composites fibras de carbono-resina, fibras musculares y tejidos vegetales.

En este trabajo se presenta un estudio teórico-experimental de la señal ultrasonora retrodifundida por un medio con fibras difusoras paralelas, con un paso que varia entre 0,1 y 1 mm. La anisotropía acústica del medio, que depende de la disposición de las fibras, determina las propiedades elásticas del mismo. Por otro lado, la periodicidad del medio determina las frecuencias espaciales que se filtrarán en la propagación del campo acústico. Se utiliza un método de correlación espacial desplazando un transductor monoelemento, de frecuencia de resonancia 2,5 MHz., sobre direcciones paralelas al plano de las fibras. Se compara el comportamiento de la función de correlación entre las señales retrodifundidas obtenida experimentalmente con un modelo teórico en el que se adapta el formalismo de la Acústica de Fourier a un régimen impulsional.

## THEORETICAL TRANSIENT SELF-FOCUSING IN BIASED PHOTOREFRACTIVE MEDIA AND EXPERIMENTAL EVIDENCE ON $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$

*N. Fressengeas<sup>°\*</sup>, J. Maufroy<sup>°</sup> and G. E. Kugel\**

<sup>\*</sup>Université de Metz-Supélec/CLOES/MOPS - <sup>°</sup>Supélec/SEL

2, rue Edouard Belin, 57078 METZ Cedex 3, FRANCE

*Key-words:* photorefractive effect, self-focusing

The ability to generate spatial solitons in photorefractive media at microwatt power level has recently been the topic of considerable interest, owing to the all optical routing and beam re-shaping applications they foreshadow. The main obstacle to these applications is the potentially slow photorefractive time response. Using a one dimensional band transport model, we have analytically shown that the photorefractive effect could behave like a saturable quasi-local second order effect, provided the crystal is properly biased with an external electric field or by the presence of a photovoltaic effect. Furthermore, the photorefractive effect still behaves transiently like a quasi-local effect for optical powers inducing photorefractive saturation. This implies that an incident beam can undergo strong transient self-focusing and relax to a less focused state once the medium has saturated, in accordance with numerical simulations. These assertions are fully described by the dimensionless normalized wave propagation equation below, which we deduced from the one dimensional band transport model:

$$i \frac{\partial U}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \left( 1 - e^{-\frac{I_0 (1+|U|^2)}{\Sigma}} \right) \left( N^2 - D \frac{\partial |U|^2}{\partial x} \right) \frac{U}{1+|U|^2} - E_N(x) e^{-\frac{I_0 (1+|U|^2)}{\Sigma}} U = 0$$

Here,  $U$  is the wave electric field,  $I_0$  the dark intensity,  $\Sigma$  an energy density characteristic of the relaxation process and  $E_N(x)$  the electric field in its initial state.  $N$  and  $D$  are characteristic of experimental conditions. In order to validate our theoretical treatment, we achieved systematic investigations on a  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  crystal, for both steady-state and transient self-focusing. Our steady-state results and especially the value of the output beam diameter as a function of the peak power to dark irradiance ratio are consistent with published results. Furthermore, a transient self-focusing has been observed, which is in accordance with the above analysis. These experiments highlight the key role played by the dark irradiance in the saturation process. They show that its effects can be simulated and controlled by shedding a uniform background light upon the whole crystal, allowing to modify the process of photorefractive saturation.

## SECOND HARMONIC GENERATION IN $\text{K}_6\text{Li}_4\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ (KLN) AND EFFECTS OF NON-STOECHEIOMETRY

*W. Fortin<sup>\*</sup>, G. E. Kugel<sup>\*</sup> and D. Rytz<sup>°</sup>*

<sup>\*</sup> M.O.P.S.-C.L.O.E.S. Université de Metz, 2 rue Edouard BELIN, 57078 METZ Cedex 3, FRANCE.

<sup>°</sup> FEE, Struthstr. 2, D-55743 IDAR-OBERSSTEIN, GERMANY.

*Key-words:* second harmonic generation, Raman spectroscopy, defects in materials

To build optical high density data storage devices, it is necessary to conceive compact blue laser sources; one way is to use second harmonic generation in  $\text{KNbO}_3$ . But this material presents technological limitations due to its mechanical instabilities. An other material,  $\text{K}_6\text{Li}_4\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$  presents better stability for similar non-linear properties. However, stoichiometric composition  $\text{K}_6\text{Li}_4\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$  is not possible to be obtained. Excess of Nb always occurs, which modifies the phase transition and optical properties. The quantitative characterisation of this excess in KLN crystal is performed by Raman spectroscopy study on several samples with different Nb concentrations, in order to evaluate these concentrations, and their influence on dynamical and optical properties. Our measurement pointed out additionally the presence of an overdamped soft mode visible near the phase transition temperature which would be related to the dielectric properties of the system. Furthermore, it was seen that the frequency of the  $\text{NbO}_6$  octaetra breathing mode is strongly correlated with Nb content. This position can be used as a probe to measure the nonstoichiometry. Based on the dispersion of the index, we show that for  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  concentration higher than 54% mole, collinear type I phase matching is impossible to perform with 1064 nm fundamental beam. This fact is confirmed experimentally. On the contrary, it was possible to perform SHG with noncollinear phase matching with experimental conditions involving an internal reflection of the fundamental beam on the crystal face. The geometry of the experiment is consistent with known index values. These specific conditions of SHG are interesting for quasi phase matching in wave-guides.

## Propriedades Ópticas Lineares e Não-lineares da L-Treonina

L. Misoguti, S. C. Zilio, V. S. Bagnato e F. D. Nunes  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chaves:* Cristais Orgânicos, L-Treonina, Óptica Não-linear

Atualmente é inegável que os fenômenos de óptica não-linear permitem um grande avanço de qualidade em muitos dispositivos ópticos. Uma presença maior dessa tecnologia depende basicamente de se encontrar materiais "ideais" que conjuguem simultaneamente uma série de propriedades apropriadas para o funcionamento de um dispositivo. Propriedades como coeficientes não-lineares elevados, baixa absorção de luz no comprimento de onda de trabalho, etc. Caminhando neste sentido, há uma constante pesquisa para se encontrar novos materiais com propriedades não-lineares. Os avanços no crescimento de bons cristais orgânicos e a descoberta de suas propriedades não-lineares permitiram colocá-los como novos materiais com potencial para aplicação em óptica não-linear. Neste trabalho estudamos e caracterizamos a L-Treonina.

A L-Treonina ( $C_4H_7O_3N$ ) é um cristal orgânico biaxial ortorrômbico do grupo de simetria  $P2_12_12_1$ , crescido em solução aquosa. Medimos algumas de suas propriedades lineares como o seu índice de refração em função do comprimento de onda e da temperatura, determinando o elipsóide de índice; o coeficiente de absorção em função do comprimento de onda, o que determina o espectro de transparência do material. Além disso, determinamos propriedades não-lineares como geração de segundo harmônico (GSH). Obtivemos as direções de casamento de fase para GSH (*loci*) e os valores relativos dos coeficientes não-lineares  $d$  ao longo do *loci*, para conversão de 1064 nm para 532 nm.

O cristal de L-Treonina tem índices de refração próximos de 1,60 e espectro de transparência entre 250 nm e 1500 nm. Quanto a geração de segundo harmônico ela demonstrou eficiência semelhante ao do KDP. Em vista disso, podemos colocar a L-Treonina como material com propriedades não-lineares que poderá ter futuras aplicações.

(Apoio Financeiro FAPESP, RHAe e CNPq)

## CONVERSÃO ASCENDENTE DO INFRAVERMELHO PARA O VISÍVEL EM CRISTAIS DE YLF DOPADOS COM Tm E Ho.

*Luiz Vicente Gomes Tarelho, Edison Puig Maldonado, Gregorio Perez Peiro, Laércio Gomes, Nilson Dias Vieira Jr, Izilda Márcia Ranieri e Spero Penha Morato.*

Divisão de Materiais Optoeletrônicos - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/ SP

*Palavras Chave:* conversão ascendente, laser de diodo, terras-raras

O cristal Tm:Ho:YLF é um meio laser ativo cuja ação laser se dá em 2,1  $\mu$ m eficientemente bombeado por laser de semiconductor CW sintonizado em 796 nm. Um processo de perda dessa ação laser é a conversão ascendente da energia absorvida na região do infravermelho e reemitida na região visível. Por outro lado, esse processo propicia a ação laser no visível a partir do bombeamento no infravermelho.

A caracterização desses processos de conversão ascendente foi efetuada utilizando-se as técnicas convencionais de absorção e emissão luminosa na região espectral de interesse.

A conversão ascendente observada proporciona um espectro fluorescente com emissões na região do azul, verde e vermelho. A análise espectroscópica mostrou que as emissões no azul e vermelho são provenientes dos estados excitados de Tm ( $^1G_4$  e  $^3F_3 - ^3F_2$ ) enquanto que a emissão verde provém do nível  $^3S_2$  do Ho. As transições relacionadas com a conversão são provenientes da absorção do estado excitado  $^3H_5$  do Tm e  $^3I_1$  do Ho sendo que o nível do Ho foi populado anteriormente por uma transferência de energia Tm  $\rightarrow$  Ho altamente eficiente.

A dependência das emissões no visível com a potência de bombeamento é quadrática, demonstrando que esses processos envolvem a absorção de dois fótons.

( FAPESP, CNPq, FINEP )

## Synchrotron Radiation Multiple Diffraction in MBANP Organic Nonlinear Optical Material: Electric Field Effect to the in-plane Mosaic Spread

Luis Humberto Avanci<sup>1</sup>, Lisandro Pavie Cardoso<sup>1,2</sup>, Susan Elizabeth Girdwood<sup>2</sup>, David Pugh<sup>2</sup>, John Neil Sherwood<sup>2</sup>, José Marcos Sasaki<sup>3,4</sup> and Kevin John Roberts<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brazil

<sup>2</sup>Department of Pure and Applied Chemistry, University of Strathclyde, Glasgow, UK

<sup>3</sup>Department of Mechanical and Chemical Engineering, Heriot-Watt University, Edinburgh, UK

<sup>4</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará, Brazil

**Key words:** X-ray Multiple Diffraction, Synchrotron radiation, Organic Crystal

The use of X-ray multiple diffraction surface reflections in the investigation of the electric field effect to the crystalline perfection in the surface plane of MBANP organic nonlinear optical material is described. Using high resolution X-ray multiple diffraction one can assess subtle changes in the lattice parameter and crystal symmetry as a function of electric field strength. Cases of extreme asymmetry where the diffracted beam is propagating parallel to the primary planes, i.e., the sample surface, carry information about the crystalline perfection on the surface plane (in-plane mosaic spread). A computer program based on the theory of X-ray multiple diffraction for mosaic crystals was developed in our Group (Morelhão & Cardoso, *J. Appl. Phys.* (1993), 73(9), 4218). It provides unit cell parameters and in-plane mosaic spread through the fitting of the three-beam surface peak position and profile, respectively, even when the sample consists of an epitaxial system (layer and substrate). The data collection for this study was carried out using the high resolution Renninger scanning set-up on station 7.6 of the SRS at Daresbury Laboratory, UK. Renninger scanning measurements of the two surface secondary peaks ( $10\bar{3}$ ) and ( $\bar{1}0\bar{3}$ ) about the  $\chi = 0^\circ$  symmetry mirror and ( $0\bar{1}\bar{3}$ ) and ( $01\bar{3}$ ) about the  $\chi = 90^\circ$  one were used in order to determine the changes in the unit cell parameters and also in the in-plane mosaic spread with an increasing electric field up to 500 V/cm. Preliminary results indicate that changes in the lattice parameters are expected for an electric field parallel to the twofold monoclinic  $b$  axis whereas the unit cell angles are affected when the field is parallel to  $a$  axis.

(CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO DE NANOCRISTAIS DE CdTe POR ESPECTROSCOPIA ÓPTICA

P.T.C. Freire, M.A.A. Silva

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-760 Fortaleza, Ceará

V.C. Reynoso e V. Lemos

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, 13083-970 Campinas, S.P.

**Palavras-chaves:** espectroscopia, nanocristais, caracterização

Este trabalho mostra resultados de luminescência e espalhamento Raman em "quantum dots" de CdTe embebidos em matrizes de vidro. Amostras tratadas com diversos tempos de permanência a 580°C foram analisadas. A emissão é uma banda única em todos os espectros exceto para o caso da amostra tratada durante o menor intervalo de tempo (dez minutos apenas). Foi observado um aumento sistemático da energia de emissão com o tempo de tratamento. Este resultado mostra que o raio médio do grão varia de amostra para amostra, o maior sendo da ordem de 2,5 nm. O espectro Raman deste material é dominado por um pico a 161  $\text{cm}^{-1}$  e com largura de linha de 9  $\text{cm}^{-1}$ . Não há diferença sensível nos espectros Raman para as várias amostras da série. O pico Raman aparece nestes amostras deslocado para baixas energias em relação ao fonon longitudinal óptico do CdTe "bulk". Este deslocamento é interpretado em termos de localização da função de onda do fonon. Para uma amostra crescida de forma similar, com tratamento térmico de vinte e dois minutos a 560°C, foi realizado um estudo da dependência do espalhamento Raman com a pressão. As medições foram realizadas a temperatura ambiente e com excitação próximo às condições de ressonância com a energia de transição mais baixa. O intervalo de pressão foi limitado a [1 bar - 42 GPa], dado a transição de fase estrutural de sulfeto de zinco a cloreto de sódio que ocorre neste material a 41 GPa. Na fase a altas pressões, o espalhamento Raman é de primeira ordem é proibido dado a presença de simetria de inversão. Foi visto que a largura de linha sofre alteração desprezível com pressão, indicando que os grãos permanecem monocristalinos. O pico se desloca linearmente para altas energias com o aumento da pressão. Os coeficientes de pressão são fornecidos neste trabalho.

(CNPq, FAPESP, FAEP-UNICAMP)

## Measuring electro-optical coefficients of biaxial organic crystals

*D. V. Magalhães, N. Nakagaito, L. Misoguti, V. S. Bagnato, S. C. Zílio e F. Dias Nunes*  
Instituto de Física de São Carlos - USP

Palavras-Chave: Electro-optical, Biaxial, Organic

This work reports on the characterization of amino-acids organic crystals, which in general are anisotropic and biaxial. The use of longitudinal and transversal modulation technique [1], widely used for uniaxial crystals, in the case of biaxial crystals is not appropriated and the causes for that is discussed in this work. For this reason, the electro-optical coefficient  $r_{ij}$  [ $i=(1-6)$ ,  $j=(1-3)$ ] of the amino-acids (L-alanine, L-threonine and L-asparagine) is measured through phase modulation using a Mach-Zehnder interferometer. Also are reported the details of the system and the detection techniques used in the measurements. The values of the electro-optical coefficient are measured and compared with traditional materials as KDP.

1- Amnon Yariv and Pochi Yeh, Optical Waves in Crystals, John-Wiley and Sons, 1984.

Apoio: RHAÉ, CNPq, CAPES e FAPESP

## TUNELAMENTO RESSONANTE EM SUPER-REDES QUASI-PERÍODICAS DE $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$

Jean C. N. de Souza, L. A. Cury, W. N. Rodrigues, A. G. de Oliveira

Departamento de Física - ICEX / UFMG  
CP 702, CEP 30161-970, Belo Horizonte, MG

*palavras-chave: fibonacci, coeficiente de tunelamento, matriz de transferência*

Investigamos as propriedades de transporte elétrico através de cálculos do coeficiente de tunelamento em heteroestruturas do tipo super-redes, dispostas segundo uma sequência de *Fibonacci* de segunda ordem de passo  $N \geq 5$ . Determinamos o coeficiente de tunelamento utilizando o método de matriz de transferência para diversas concentrações de alumínio ( $x$ ), largura das camadas de  $Al_xGa_{1-x}As$  (barreira quântica) e  $GaAs$  (poço quântico) e o passo ( $N$ ) que define a heteroestrutura. Os cálculos foram efetuados na ausência de campos elétrico e magnético. A super-rede quasi-periódica é obtida pela superposição das camadas de  $Al_xGa_{1-x}As$  e  $GaAs$  correspondendo, respectivamente, às unidades  $A$  e  $B$ , onde uma unidade  $A$  gera uma  $AB$  e uma unidade  $B$  gera uma unidade  $A$ . Inicializando a sequência com  $S_1 = A$ , obtemos por métodos recursivos os demais termos da sequência:  $S_2 = AB$ ,  $S_3 = ABA$ ,  $\dots$ ,  $S_N = S_{N-1} + S_{N-2}$ . Através do cálculo do coeficiente de transmissão determinamos a posição dos níveis de energia na banda de condução. Concluímos que a posição e a largura dos níveis de energia das minibandas apresentam uma dependência com a variação dos parâmetros utilizados no cálculo. Observamos no sistema quasi-periódico, em relação ao sistema periódico, um desdobramento dessas minibandas de energia, devido à variação da estrutura do sistema. Com o aumento do passo da heteroestrutura observamos no coeficiente de tunelamento uma propriedade de sistemas quasi-periodicos devido à disposição das barreiras de potencial. As barreiras de potencial apresentam larguras duplicadas em determinadas regiões da heteroestrutura, impondo um padrão auto-similar às propriedades de transporte elétrico das heteroestruturas.

(CNPq, FAPEMIG)

## ESTUDO DE MICRO-RUGOSIDADES EM POÇOS QUÂNTICOS

José Brás Barreto de Oliveira<sup>a</sup>, Eliermes Arraes Meneses<sup>b</sup> e E. C. F. Silva<sup>c</sup>

a) Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP

b) Departamento de Física-FC, Universidade Estadual Paulista, Bauru-SP

c) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

Palavras Chaves: éxcitons, interfaces, magneto-óptica

No presente trabalho apresentamos um estudo da interface de um sistema de múltiplos poços quânticos de  $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$  usando medidas de PL e magneto-PL. Os espectros de PL mostram dois picos associados aos éxcitons livres e ligados, os quais podem ser ajustados por Gaussianas e Lorentzianas puras, respectivamente. O deslocamento diamagnético para o estado excitônico fundamental (1S) se relaciona com o campo  $B$ , aplicado na direção de crescimento, como  $\Delta E = (e^2 B^2 / 8\mu) \langle \Psi | x^2 + y^2 | \Psi \rangle$ , onde  $\mu$  é a massa reduzida do éxciton no plano x-y e  $(\langle \Psi | x^2 + y^2 | \Psi \rangle)^{1/2}$  representa a dimensão lateral do éxciton. A partir dos valores de  $\Delta E$  e da largura de linha da PL calculamos o tamanho médio das micro-rugosidades usando a teoria de Singh [2]. O valor encontrado de 37 Å é comparável aos resultados obtidos através de Microscopia Eletrônica de Transmissão para o mesmo sistema  $GaAs/GaAlAs$  [2]. Apresentamos também o comportamento das larguras de linha da PL, em função do campo  $B$  aplicado, e comparamos com os obtidos pela teoria de Singh [2].

[1] - J. Singh and K. K. Bajaj, J. Appl. Phys. 57, 5433 (1985)

[2] - A. Ourmazd et. al, Phys. Rev. Lett. 62, 933 (1989)

## PHOTOCURRENT PROPERTIES OF $\delta$ -Si DOPED InGaAs MULTI-QUANTUM WELL HETEROSTRUCTURE

V. L. Campo Jr., D. I. Lubyshev, P. P. Gonzalez-Borrero, P. Basmaji and E. Marega Jr.  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

Palavras-Chave: semiconductor, Photoconductivity, photodetector

The semiconductors thin films with doping level near Anderson transition have high photosensitivity in the photoconductivity regime. The maximum sensitivity of these photodetectors occurs under illumination when the system transform from semi-insulating to semi-metal. The ratio between deep and shallow levels concentration in this case should be near the unity with a total impurity concentration near  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , that difficult to control at the bulk doping. The frequency response in these devices are limited by absorption thickness (~500-300 nm).

In present work we report the results of visible-infrared photodetector (PD) preparation by using molecular beam epitaxy. For development of frequency response and wavelength range increase to infrared area we use  $\delta$ -doped  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  multi-quantum well and the doping level in  $\delta$ -Si layer on the middle of QW was  $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , that was enough for shift of deep levels-shallow levels concentration ratio to Anderson transition in the area near QW. At the illumination all photoexcited carriers was collected by QW. The deepness of photosensitivity space area is limited by few nanometers near the QW, that increase the frequency properties of PD. Photocurrent spectra show high sensibility ( $\Delta R/R=20\%$ ) at cut-off frequency up 1.25 eV. This explain strong optical absorption by QW in the infrared area.  
(CNPq, FAPESP, FINEP)

## EFEITO DA INTERAÇÃO ELÉTRON-FONON SOBRE A MASSA DE CÍCLOTRON DE ELÉTRONS QUASE-UNIDIMENSIONAIS

*Francisco Aparecido Pinto Osório*  
Departamento de Física- Universidade Federal de Goiás  
*Oscar Hipólito*  
Instituto de Física de São Carlos USP

Calculamos a massa efetiva de magnetopolarons presentes em fios quânticos quase-unidimensionais de GaAs e InSb, obtidos por efeito de campo a partir de heteroestruturas de GaAs-AlGaAs e estruturas de metal-óxido-semicondutor de InSb. Consideramos o potencial de confinamento do elétron como sendo infinito na direção z e parabólico na direção y com energia  $\hbar\Omega$ . Verificamos que o comportamento da massa efetiva em função do campo magnético é bem diferente daquele para sistemas eletrônicos 2D e 3D. Nestes sistemas a massa efetiva cresce, a partir do polaron, com o campo magnético aplicado em toda a região abaixo da ressonância, sofrendo uma descontinuidade quando a frequência de ciclotron ( $\omega_c$ ) é igual à frequência dos fonons LO ( $W_{LO}$ ). Para campos magnéticos fortes  $\omega_c > W_{LO}$  a massa ciclotrônica é menor que a massa de banda do elétron e desta se aproxima quando  $\omega_c \rightarrow \infty$ . No caso quase-unidimensional verificamos que a massa ciclotrônica na região abaixo da ressonância diminui de valor com o aumento do campo aplicado, atingindo um valor mínimo e voltando a crescer novamente. O grau de distinção entre estes sistemas aumenta quanto maior for a relação entre o potencial de confinamento e a energia do fonon LO do material. Para um fio quântico de GaAs, o potencial de confinamento é pequeno ( $\hbar\Omega < 2\text{meV}$ ) frente a  $W_{LO}$  (36,77 meV), de modo que a principal diferença entre os resultados para sistemas Q1D e 2D localiza-se na região de campos fracos. Para campos magnéticos, tais que  $\lambda_c^2 > 0,3$ , os resultados Q1D e 2D coincidem, ou seja, a energia do campo magnético vence o potencial de confinamento e o elétron se comporta como se estivesse livre (2D).

## VALENCE BAND STRUCTURE AND OPTICAL ABSORPTION IN P-TYPE MULTIPLE QUANTUM WELLS INFRARED PHOTODETECTORS UNDER AN APPLIED ELECTRIC FIELD

*J. Depeyrot<sup>†</sup>, R. Melliti<sup>‡</sup>, P. Tronc<sup>‡</sup>, A. Majerfeld<sup>††</sup> & E. Mao<sup>††</sup>*

<sup>†</sup> UnB - Departamento de Física - Brasília

<sup>‡</sup> ESPCI - Lab. d'Optique Physique - Paris

<sup>††</sup> Department of Electrical and Computer Engineering - University of Colorado - Boulder

**Palavras-Chave:** quantum well, intersubband absorption, electric field

Intersubband absorption in p-type Multiple Quantum Well (MQW) infrared photodetectors subjected to an electric field parallel to the growth axis is theoretically investigated for normal incidence operation. In the present analysis hole eigenstates are obtained exactly using Airy functions and the envelope function approximation. In-plane dispersion relations are calculated. Absorption of light at normal incidence is determined from the overlap between the envelope functions of the initial and final states and the corresponding momentum matrix elements. The final states involved in the optical transitions of interest are extended states with energies close to that of the barriers. In the presence of an electric field the dispersion curves in the plane of the layers are shown to be highly non-parabolic and anisotropic. The first light hole band is electron like near  $\Gamma$  point. We will show that the spin splitting due to the lack of inversion symmetry is an increasing function of the electric field strength. The density of states for the final states is strongly dependant on the sign and the magnitude of the voltage applied to the structure. It will be discussed that the absorption coefficient of a given well depends on its position in the structure. Finally the calculated absorption peak wavelength of the MQW structure is in good agreement with the experimental absorption spectra observed for a 10 period carbon doped MQW structure ( $N_a = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ).

(CNRS/NSF)

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓTICAS DO InP CRESCIDO POR CBE

*Edson Laureto\*, José B. B. de Oliveira, Márcio A. Pudenzi, Mauro M. G. de Carvalho, Cesar A. C. de Mendonça, Eliermes A. Meneses*

\*Depto. de Física, Centro de Ciências Exatas, Universidade Estadual de Londrina - PR  
Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas - SP

**Palavras-Chave:** cbe, fósforo de índio, fotoluminescência

Foram investigadas as propriedades elétricas e óticas do InP utilizando as técnicas de efeito Hall a 300 K e fotoluminescência (PL) a baixas temperaturas, respectivamente. As amostras foram crescidas pela técnica de CBE (Epitaxia por Feixe Químico). Para o crescimento do InP foram usadas  $\text{PH}_3$  e TMI (trimetil-índio) como fontes de Fósforo e Índio. Foram feitas dopagens com Silício tanto homogêneas como planarmente (do tipo delta). Os espectros de fotoluminescência são bem distintos para diferentes níveis de dopagem. Um mecanismo de recombinação em 1,389 eV é evidente nos espectros de todas as amostras dopadas, e é interpretado como uma transição relacionada ao Si como impureza aceitadora no InP. Um pico em 1,401 eV, nunca antes mencionado na literatura, é verificado em amostras onde se constatou, através de medidas SIMS, a incorporação de As. Tal impureza é isoeletrônica no caso de substituir átomos de Fósforo na rede do InP. Outros elementos da coluna V da Tabela Periódica, como  $\text{Bi}^{(1)}$  e  $\text{Sb}^{(2)}$ , são impurezas isoeletrônicas no InP, gerando estados ligados com energia próxima à energia da banda proibida devido, principalmente, às diferenças em eletronegatividade e raio atômico entre o átomo da rede e o átomo de impureza. Os resultados deste trabalho indicam que o estado ligado responsável pelo pico de luminescência em 1,401 eV possui as mesmas características dos estados gerados pelas impurezas isoeletrônicas de Bi e Sb. Aplicando o modelo teórico usado nos casos de Bi e Sb em InP, foi encontrado um valor para a energia de ligação do estado ligado, gerado pela impureza de As, que é compatível com os observados para as outras impurezas. Portanto, a hipótese de transição envolvendo a impureza isoeletrônica de As é a mais provável para a descrição física da luminescência em 1,401 eV nas amostras de InP.

(1)- W. Ruhle e colaboradores, Phys. Rev. B 18 (12), 7022 (1978).

(2)- S. G. Bishop e colaboradores, Phys. Rev. B 28 (12), 8469 (1988).

## DINÂMICA DE REDE DO $\alpha$ -Sn, Ge e Si PELO POTENCIAL DE MORSE.

J.R. Campanha<sup>(1)</sup> e M.M. Shukla<sup>(2)</sup>

(1) Depto de Física, UNESP, Rio Claro, S.P.

(2) Depto de Física, UNESP, Bauru, S.P.

*Palavras-Chave:* Curva de dispersão, potencial de Morse.

O potencial de Morse dado por:

$$\Phi(r) = D[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}]$$

é um potencial molecular com 3 parâmetros  $\alpha$ ,  $D$  e  $r_0$ , que podem ser determinados pelas seguintes condições:

- i) valor do potencial para  $r = r_0$ , isto é,  $\phi(r_0) = -D$  onde  $\phi(r_0)$  é a energia de coesão.
- ii) condição de equilíbrio do cristal, isto é, a primeira derivada do potencial anula-se para  $r = r_0$ .
- iii) relação existente entre a compressibilidade e a segunda derivada do potencial.

Em nosso trabalho<sup>1</sup>, fomos os primeiros a aplicar o potencial de Morse para semicondutores, onde calculamos a curva de dispersão do diamante. Nesse trabalho, apresentamos os resultados teóricos da curva de dispersão de outros três semicondutores, i.e.,  $\alpha$ -Sn, Ge e Si pelo potencial de Morse comparados com dados experimentais de fonons. Chegamos a conclusão de que, para semicondutores, somente o uso do potencial de Morse não explica a dinâmica da rede. Deve ser incluído a interação de força angular que fará parte de um trabalho futuro.

1. M.M. Shukla & J.R. Campanha - Dispersion of phonon waves in diamond by Morse Potential function. XIII Simpósio Latino Americano de Física do Estado Sólido (SLAFES), 5 a 10 nov., Gramado, Brasil.

## INFLUÊNCIA DA FONTE EXTERNA SOB A FORMAÇÃO DE ESTRUTURAS DISSIPATIVA EM SEMICONDUTORES FOTOEXCITADOS

*Antonio Sergio Cavalcante Espêridião*

Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

*Palavras-Chaves:* estrutura dissipativa, semicondutor, bifurcação

Usando a teoria linear de estabilidade, estudamos a estabilidade do estado estacionário homogêneo, contra a formação de uma estrutura dissipativa espacialmente ordenada. Para tal fim derivamos as equações de evolução das flutuações inhomogênea em torno do estado estacionario. Investigamos a formação de estruturas dissipativas quando iluminamos com diferentes fontes uma amostra semicondutora. A presença de um estado auto-organizado espacialmente é verificada quando iluminamos com um laser contínuo. O estudo é baseado na técnica do operador estatístico de não equilíbrio devido a Zubarev para obter as equações de evolução. A evidência da formação da estrutura dissipativa é feita através da análise da parte real da função dielétrica do sistema, o qual é constituído por elétrons e buracos. Determinamos também a concentração crítica de portadores a partir da qual é permitida a existência de tais estruturas dissipativas. Quando substituímos o laser por uma fonte de largo espectro continuamos a verificar a formação da estrutura dissipativa, porém a primeira bifurcação não ocorre quando  $Q \rightarrow 0$ .

## SUPERSYMMETRY AND ELECTRON-HOLE EXCITATIONS IN SEMICONDUCTORS AT FINITE TEMPERATURE

*Xun Xue and A. Ferraz*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

**Keywords:** Superconductivity, semiconductors

Nambu pointed out the quasi-supersymmetry of the BCS model of superconductivity. The mass of the low excitations in the model, the zero mass bosonic phase or  $\pi$  mode, the fermionic excitations with mass  $\Delta$  and bosonic amplitude or Higgs mode of mass  $2\Delta$ , are in the ratios  $0 : 1 : 2$ . It can be shown that the static part of the corresponding effective hamiltonian is truly supersymmetric at  $T = 0$  and the boson and fermion excitations can be mapped into one another and the model is equivalent to  $1 + 1$  supersymmetric quantum mechanics.

In the present work we deal with the fermionic and bosonic low electronic excitations in a pure semiconductor at finite temperature. For a direct gap semiconductor we have shown that the single fermion and boson masses also define a  $0 : 1 : 2$  ratio at zero temperature. However, it is known that even if supersymmetry exists at zero-temperature it will be spontaneously broken at finite temperature due to the fact that fermions and boson are clearly distinguishable from each other when they couple to a heat bath. We therefore first derive from first principles, the finite temperature form of the effective action and show that the mass relation between the existing excitations is lost. This generalized model however does not reveal the real physical properties of the low energy lying excitations in the semiconductor. We are therefore led to construct a new effective action for the low energy lying excitations of the semiconductor at finite temperatures. When we do this, the model is shown to maintain both its supersymmetry and the mass relations as proposed earlier by Nambu.

## ESTUDO DE PROCESSOS DISSIPATIVOS DURANTE A RELAXAÇÃO SEMICONDUCTORES FORTEMENTE FOTO-EXCITADOS

*<sup>1</sup>Antonio dos Anjos Pinheiro da Silva e \*Antonio Carlos Sales Algarte*

<sup>1</sup>Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Centro Universitário de Corumbá, Departamento de Ciências Exatas; \*Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Física "Gleb Wataghin".

**Palavras-Chave:** semicondutores, relaxação, fonons quentes

Nesse trabalho é feito uma aplicação do método do operador estatístico de não equilíbrio (MOENE), utilizando-o na investigação dos processos dissipativos ocorrendo durante a relaxação ao estado de equilíbrio de um plasma fortemente excitado, foto-injetado num semiconductor. É realizado um estudo da influência da geração de fonons em estado de não equilíbrio (fonons quentes), da blindagem da interação elétron-fonon, da difusão ambipolar e da emissão de radiação eletromagnética por recombinação elétron-buraco, nas diversas taxas de transferência de energia. Nosso objetivo foi fazer um estudo comparativo desses processos para semicondutores polares, intrínsecos de "gap" direto. Consideramos também a cinética ultra-rápida de evolução de fonons ópticos onde a interação anarmônica, com os fonons acústicos, foi tratada na aproximação do tempo de relaxação. Entre os fonons acústicos e o reservatório é suposto um bom contato térmico, de modo que os primeiros possam estar em equilíbrio permanente com o banho térmico. O estado do sistema de fonons quentes é descrito em termos do conceito de temperatura de não equilíbrio por modo, a qual pode ser caracterizada e medida experimentalmente. O tempo de emissão de fonons ópticos mostra que fonons bastante afastados do equilíbrio são produzidos, preferencialmente, numa região reduzida da zona de Brillouin. Esses fonons são os responsáveis pelo fenômeno chamado "overshoot" da temperatura de fonons quentes. Esse efeito desempenha um papel crucial no processo de relaxação. Todos esses fenômenos são investigados nos semicondutores GaAs, InSb e CdSe em diferentes condições de excitação. Finalmente fazemos uma comparação dos resultados obtidos com dados experimentais. (CAPES)

## TUNELAMENTO RESSONANTE DE BURACOS EM POÇOS DUPLOS NA PRESENÇA DE CAMPOS ELÉTRICOS E MAGNÉTICOS

Márcio Adriano Rodrigues Souza

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

Instituto de Física de São Carlos - USP

Valmir Antonio Chitta

Departamento de Física

Universidade Federal de São Carlos

*Palavras-Chave:* poço quântico, tunelamento ressonante, estrutura eletrônica

Investigamos a influência dos campos elétrico e magnético uniformes aplicados nas direções de crescimento e perpendicular, respectivamente, sobre o tunelamento ressonante de buracos e elétrons em um sistema composto por dois poços quânticos acoplados;  $GaAs-100\text{\AA}/Al_{0.35}Ga_{0.65}As-60\text{\AA}/GaAs-50\text{\AA}$ . A equação de Schrödinger é resolvida numericamente dentro do formalismo da função envelope, onde o Hamiltoniano que descreve o sistema é do tipo  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  (6X6), o qual considera as interações entre as bandas de condução e valência. A técnica numérica usada para resolvermos a equação de Schrödinger independente do tempo tem por base o método da potência inversa e diferenças finitas. Calculamos a estrutura eletrônica para vários valores de campos elétricos e magnéticos, obtendo então os campos necessários para produzir o tunelamento ressonante de buracos entre os poços. Verificamos que buracos pesados que estavam inicialmente localizados no poço estreito podem tunelar não só para estados de buracos pesados, mas também para estados de buracos leves no outro poço devido ao acoplamento entre as bandas. Examinamos ainda a influência da direção do campo magnético no plano perpendicular à direção de crescimento sobre a estrutura eletrônica. Calculamos também o tempo de tunelamento dos buracos entre os poços a partir da evolução temporal de pacotes de onda na condição de ressonância.

(CNPq)

## ESPECTROSCOPIA DE TUNELAMENTO DE ÉXCITONS INDIRETOS

Bernardo. R.A.Neves<sup>1</sup>, L. Eaves<sup>2</sup>, T.M. Fromhold<sup>2</sup>, P.C. Main<sup>2</sup>, M. Henini<sup>2</sup> e G. Hill<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, ICEX, UFMG, Belo Horizonte, MG

<sup>2</sup> Dept. of Physics, University of Nottingham, Nottingham, Inglaterra

<sup>3</sup> Dept. of Electronic Engineering, University of Sheffield, Sheffield, Inglaterra

Neste trabalho, nós empregamos uma heteroestrutura de barreira simples dopada tipo p-i-n para investigar os estados eletrônicos de um sistema acoplado composto de um gás de elétrons 2D e de um gás de buracos 2D separados por uma barreira de AIAs. Em baixas temperaturas, a curva  $I(V)$  do dispositivo mostra uma série de cinco picos bem definidos na corrente de tunelamento na região de voltagem entre 1.56V-1.62V, que é exatamente acima do limiar do fluxo de corrente (veja a fig. 1). A dependência destes picos com o campo magnético paralelo ou perpendicular à corrente foi investigada. Estudos cuidadosos de estruturas semelhantes com quantidades controladas de impurezas na barreira mostram que os picos observados não advêm de tunelamento assistido por impurezas. Nós mostramos que a posição e o espaçamento dos picos pode ser explicada usando um modelo de tunelamento via estados de éxciton. O modelo é quantificado pelo cálculo da corrente de tunelamento, baseado no método do Hamiltoniano de transferência e num cálculo que incorpora a interação do elétron com o buraco através da barreira. O estado inicial do processo de tunelamento é um éxciton indireto espacialmente, no qual um elétron e um buraco isolados nas suas respectivas camadas de acumulação, interagem via suas mútuas interações Coulombianas. O tunelamento pode ocorrer quando ambos momentum transversal e a energia destes éxcitons indiretos coincidem que aqueles dos estados excitados de um éxciton espacialmente direto formado no lado dopado tipo-p do dispositivo.

Acima de 1.6V, correspondendo a um densidade de elétrons (buracos) nas camadas de acumulação da ordem de  $\sim 1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ , o sistema elétron-buraco na região da barreira se transforma de um gás excitônico para dois gases degenerados de elétrons e buracos acoplados, que são investigados através das magneto-oscilações na corrente de tunelamento, que são periódicas em  $I/B$ .

(CNPq)

## Determinação por RHEED da composição de ligas semicondutoras IV-VI crescidas por MBE

P.H.O. Rappl, E. Abramof, S.O. Ferreira, H. Closs, C. Boschetti, I.N. Bandeira

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE/LAS, CP 515, São José dos Campos, SP

**Palavras-Chave:** semicondutores, crescimento epitaxial, RHEED

Semicondutores de telureto de chumbo com estanho ( $Pb_{1-x}Sn_xTe$ , onde  $x$  é a porcentagem atômica de Sn) são utilizados para a fabricação de dispositivos infravermelhos devido a facilidade com que são sintonizados no comprimento de onda escolhido, sendo possível cobrir o espectro de 5 a 12  $\mu m$  a 77 K variando  $x$  de 0 a 0,20. Os substratos normalmente utilizados são monocristais (111) de  $BaF_2$  ou a estrutura  $BaF_2/CaF_2/Si$ , sendo que esta última é crescida no próprio MBE (Riber 32 P). Como a liga é crescida através de células de efusão individuais contendo PbTe, SnTe e Te, para a formação de um composto estequiométrico com o gap adequado, o crescimento deve ser monitorado de várias maneiras, especialmente através da reflexão por difração de elétrons de alta energia - RHEED. Esta facilidade de monitorização em tempo real permite não só a verificação estrutural das monocamadas crescidas, como também, dentro de certos limites de resolução, da composição de seus constituintes. A composição do semicondutor pode ser deduzida pela medida do espaçamento dos pontos ou linhas de difração na tela, que são proporcionais a distância interplanar e, por conseguinte, a constante de rede do material. Com este monitoramento em tempo real é possível variar os fluxos moleculares de tal forma à atingir a composição desejada da liga semicondutora. Dependendo da diferença entre as constantes de rede (2% entre o PbTe e o SnTe), da energia do canhão de elétrons e da distância entre a amostra e a tela de fósforo, a diferença de posição das linhas de difração dos compostos pode ser muito pequena (às vezes no limite da resolução da tela), e sua estimativa somente será possível através de processamento eletrônico das imagens gravadas. Um outro método alternativo para esta medida é a mudança observada no período de oscilação RHEED, quando da mudança do composto binário PbTe para o ternário  $Pb_{1-x}Sn_xTe$ . Todos estes processos só são possíveis através de detecção por uma câmara de vídeo CCD de alta resolução, gravação e processamento eletrônico do sinal.

Neste trabalho são apresentados os resultados obtidos por este sistema de monitoramento em tempo real para a determinação da composição do semicondutor.

## SELF-INDUCED PERSISTENT PHOTOCONDUCTIVITY IN RESONANT TUNNELING DEVICES

*B.R.A. Neves, E.S. Alves, J.F. Sampaio, A.G. de Oliveira, and M.V.B. Moreira*

Departamento de Física, ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais,  
Caixa Postal 702, CEP 30161-970, Belo Horizonte, MG, Brazil

**Palavras-chave:** tunelamento ressonante, fotocondutividade, centro DX

Persistent photoconductivity (PPC) in modulation-doped semiconductor heterostructures is a well known effect which is due to electron emission from DX centers in the (AlGa)As layer when the device is illuminated at low temperatures. Double barrier resonant tunneling devices have their electronic properties strongly affected by small changes in the conduction band profile. The change in the charge state of the DX centers modifies the potential profile of the heterostructure and here we consider a device designed to be sensitive to this change. Persistent photoconductivity has been observed in resonant tunneling structures, arising from Si DX centers in the (AlGa)As barriers which have diffused from the contact layers into the barrier regions. Photoionization of DX centers modifies the potential profile of a double barrier device leading to a persistent shift to lower voltages of the resonant peak position. We report the first observation of a self-induced persistent photoconductivity (SIPPC) effect in a specially designed resonant tunneling device. The SIPPC produces a permanent shift of the resonant peak to lower voltages and is caused by light generated in the RTD itself by recombination of electron-hole pairs created by impact ionization caused by hot electrons in the depletion layer. The process is controlled by the voltage applied to the device.

(FAPEMIG, FINEP, PRPq/UFMG)

## DYNAMICS OF CARRIERS TUNNELING THROUGH A DOUBLE BARRIER

*Eduardo Soares Rodrigues<sup>1</sup>, Paulo Eduardo de Brito<sup>2</sup>, Hugo Nicolas Nazareno<sup>2</sup> and Enrique Victoriano Anda<sup>1</sup>*

1 Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói-RJ, Brazil.

2 International Centre of Condensed Matter Physics, Universidade de Brasília, Brasília-DF, Brazil.

*Palavras-chave: time dependent transport, mesoscopic system, double barrier*

We have solved the dynamics of the propagation of an initially well localized particle through a double barrier in a 1-D tight-binding system with and without the presence of an applied field. Two main situations were analyzed, namely one in which the particle is initially in the interior region of the barriers and another one in which it is localized in the outside region. This problem schematically represents the situation encountered in devices such as resonant tunneling transistors. In the field-free case and when the particle is at the origin multiple reflections occur in the interior region thus forming a transient state that after a characteristic time leaks through the outside region. In the transient regime strong oscillations of definite frequency take place. In the case of an applied field, it is of interest to analyze the particle initially in the outside region and see how much is transmitted through the system. A more complex pattern is obtained in this case. We were able to calculate the transmission and reflection coefficients.

## RAZÕES PICO-A-VALE NA CORRENTE DE TUNELAMENTO EM MÚLTIPLAS BARREIRAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As COM INTERFACES GRADUAIS

*M. C. A. Lima, H. T. Anyele*

Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, Campus do Bacanga 65080-420, São Luís, Maranhão

*G. A. Farias, V. N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici 60455-760, Fortaleza, Ceará

*Palavras-Chave: corrente de tunelamento, interfaces, barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.*

Na hipótese da existência de interfaces semicondutoras abruptas, a suposição de tunelamento coerente consegue explicar a existência da resistividade diferencial negativa, produz boas previsões para os valores de pico da corrente de tunelamento, mas subestima seriamente os valores de vale da mesma, o que acarreta uma superestimação da razão pico-a-vale quando comparada com experimentos. Neste quadro, aperfeiçoamentos da fórmula de Tsu e Esaki, efeitos de massa efetiva com dependência espacial e rugosidade interfacial são considerados como mecanismos redutores da razão pico-a-vale da corrente de tunelamento, mas que não envolvem espalhamento. Infelizmente, nenhum deles mostrou-se uma solução convincente e definitiva do problema da superestimação teórica da corrente pico-a-vale da corrente de tunelamento. Para tentar solucionar esta discrepância, tem-se utilizado a suposição de tunelamento incoerente (não-sequencial) no intuito de que efeitos de espalhamento com fônons, rugosidades interfaciais ou efeitos relacionados com ambos produzam crescimento na corrente do vale. Neste trabalho investiga-se a influência de interfaces não-abruptas na corrente de tunelamento de barreiras múltiplas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As graduais. Obtém-se que a existência de interfaces faz com que a razão pico-a-vale da corrente de tunelamento seja maior que no caso de interfaces abruptas. As interfaces graduais são também responsáveis pelo deslocamento do pico da corrente para regiões de menor voltagem. Finalmente, a dependência espacial da massa efetiva nas interfaces faz com que a largura média dos picos (posição dos picos) seja menor (esteja mais deslocada para regiões de menor voltagem) do que as obtidas com a aproximação da massa constante na interface.

## EFEITO DE IMPUREZAS PLANARES EM DIODOS DE TUNELAMENTO RESSONANTE

*Paola N.P.Loja e Maria A. Davidovich*

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

*Palavras-Chave:* tunelamento, transporte, dupla-barreira

A corrente de tunelamento em dispositivos de barreira dupla é substancialmente modificada pela presença de impurezas no sistema<sup>1</sup>. Neste trabalho obtemos as curvas características de corrente versus voltagem ( curvas I-V ) em heteroestruturas de poço quântico e barreira dupla com impurezas planares introduzidas nas barreiras ou no poço. O sistema é descrito por um Hamiltoniano de ligações fortes onde os parâmetros são escolhidos de modo a reproduzir a estrutura de bandas de cada material envolvido e as propriedades de transporte são obtidas utilizando o método de funções de Green fora de equilíbrio. As cargas e o potencial eletrostático ao longo da estrutura são calculados autoconsistentemente. A estrutura eletrônica do sistema depende fortemente do acoplamento do nível de impureza com o nível do poço, variando, portanto, com a energia e a posição dos planos de impurezas na estrutura.. Esta dependência se reflete naturalmente na corrente de tunelamento. Encontramos que os efeitos são mais importantes quando as impurezas estão localizadas nas barreiras do que quando estas estão localizadas no poço. As curvas I-V são também muito diferentes caso as impurezas estejam na barreira próxima ao emissor ou próxima ao coletor, assimetria introduzida pelo potencial elétrico aplicado. Obtemos amplificação ou redução tanto da intensidade do pico de corrente quanto da relação pico/vale - razão entre o pico e o vale de corrente - dependendo do tipo de impureza e sua localização na estrutura. Nossos resultados sugerem que o desempenho de diodos de tunelamento pode ser bastante melhorado através de dopagem planar apropriada.

1. M.A.Davidovich & T. Gornsztejn, *Solid St.Comm.* 92,213 (1994).

## THE BOHM-AHARONOV EFFECT ON RESONANT TUNNELING DEVICES

*J.R. Iglesias<sup>a</sup>, E.V. Anda<sup>b</sup>, Maria A. Davidovich<sup>c</sup> and G. Chiappe<sup>d</sup>*

<sup>a</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – RS; <sup>b</sup>Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense – RJ; <sup>c</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ; <sup>d</sup>Departamento de Física, Universidad de Buenos Aires – Argentina

*Palavras-Chave:* mesoscopic ring, Bohm-Aharonov, double-barrier

The Bohm-Aharonov effect<sup>1</sup> in a mesoscopic ring containing a double-barrier structure in its upper part is investigated. The interference between the waves propagating along the upper and the lower part of the ring due to a phase shift produced by the magnetic flux is substantially modified by the presence of the double-barrier structure. When the upper branch of the ring is out of resonance there is no interference and the current and the current fluctuations are flux independent. However, changing the gate potential so as to achieve the resonance condition, the interference is re-established and the noise and the current become flux dependent. A local Coulomb interaction, characterized by a parameter  $U$ , is incorporated to describe the highly localized electrons at the well. Due to the Kondo effect, the resonance condition is satisfied for any chemical potential between the levels  $E_0$  and  $E_0 + U$ , where  $E_0$  is the localized level at the well. In this energy range the current is flux dependent. Above the Kondo temperature  $T_k$  the Abrikosov-Suhl resonance disappears and the flux independent behavior is recovered. The system is represented by a tight-binding Hamiltonian. The physical properties are numerically calculated using the Lanczos algorithm to diagonalize a cluster of 12 atoms, which includes the double barrier structure. The cluster is embedded in the ring and its contacts. In this case the result is valid for temperature  $T = 0$ . To study the temperature dependent phenomenology the physical properties are calculated diagonalizing a cluster of 3 atoms, which simulates the well and the two barriers, embedded in the ring and the contacts. For the sake of simplicity in this last approach the local Coulomb interaction is taken to be infinite. The current is studied as a function of magnetic flux, gate potential and position of the Fermi level. For  $T > T_k$  we compare our theory with recent experimental results obtained for a similar system<sup>2</sup>.

1. Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* 115, 485 (1959).

2. A. Yacoby et al., *Phys. Rev. Lett.* 74, 4047 (1995).

## A MANY BODY CALCULATION FOR A DOUBLE BARRIER SASER

*Diana E. Tuyarot, Sergio S. Makler and Enrique V. Anda*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niteroi-RJ, Brazil.

*Mikhail I. Vasilevskiy*

Faculty of Applied Physics, N. Novgorod University, Nizhni Novgorod, Russia

*palavras-chave* tunelamento, poços quânticos, dupla barreira.

In this work we developed an elemental model for a new device consisting in a double barrier heterostructure of *GaAs-AlGaAs* built in such manner to permit longitudinal optical (LO) phonons to resonate with the electronic system. An external bias is applied such that the electrons are injected in the first excited level of the well. When the resonant condition is reached, electrons decay to the ground state by emitting LO-phonons. If the Al concentration is greater than 0.3 the LO-phonons are confined. After that they decay coherently by anharmonicity in a pair of phonons. We call this device SASER by analogy with a laser. Due to the low energy and short wavelength of the phonon beam this device could be useful for imaging and for non-destructive characterization of nanostructures. It could be also used to build phonoelectronics systems (analogous to optoelectronics). In our elemental model we take into account the many body hamiltonian including the effect of the electron-phonon interaction in the calculation of the electronic current, that affect directly the behavior of the system. The electronic part is described in terms of a tight-binding Hamiltonian and the lattice dynamics is represented by a single LO-phonon mode inside the well for the primary beam and another mode for the secondary one. The electron-phonon interaction is described by a single transition matrix element between the two first levels in the well. The electron and phonon populations the current and the potential profile are calculated selfconsistently.

(CNPq, FINEP, Projeto Antorchas/Vitae/Andes grant B-11487/4B005)

## ESPECTROSCOPIA ÓTICA EM ESTRUTURAS DE TUNELAMENTO RESSONANTE

*Y. Galvão Gobato<sup>1</sup>, A.L.C. Triques<sup>1</sup>, P.H. Rivera<sup>1</sup>, P.A. Schulz<sup>1</sup>,  
M. Maialle<sup>2</sup>, Y. Guldner<sup>3</sup>, B. Vinter<sup>4</sup>*

(1) IFGW-UNICAMP- Campinas, (2) Universidade São Francisco-Itatiba, (3) Ecole Normale Supérieure- Paris-França, (4) LCR-Thomson- Orsay-França

*Palavras-Chave:* tunelamento ressonante, duplas barreiras, rugosidade de interface

Nos últimos anos, houve um grande interesse no estudo das propriedades óticas de heteroestruturas de tunelamento ressonante. Esses estudos permitiram evidenciar diferentes efeitos tais como: o tunelamento de buracos, singularidade do nível de Fermi, a formação de excitons carregados negativamente e tunelamento de excitons. Neste trabalho, realizamos o estudo da fotoluminescência (PL) e espectroscopia de excitação da fotoluminescência (PLE) em função da voltagem em heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira de *GaAs/InGaAs/AlAs*. O espectro de luminiscência nesse sistema origina-se principalmente da recombinação de elétrons no poço quântico e buracos fotocriados nos contatos do diodo a dupla barreira. Quando uma tensão é aplicada na estrutura, os buracos se acumulam no coletor e podem tunelar em estados do poço quântico (QW) onde se recombinam com os elétrons na situação de ressonância. Observamos um "splitting" no espectro de fotoluminescência com uma energia de separação de 8meV. Esse "splitting" corresponde a variações na energia de transição devido a variação de uma monocamada no poço quântico e evidencia a presença de rugosidade de interface e formação de ilhas no poço quântico. A dependência das linhas de PL com a polaridade da tensão aplicada é consistente com a assimetria da curva característica corrente-tensão *I(V)* observada quando a camada invertida encontra-se na barreira do emissor ou do coletor. Finalmente, o comportamento dos espectros de PL em função da temperatura mostra que a transferência de portadores entre as ilhas pode ser controlado com a tensão aplicada e que os estados das diferentes ilhas são seletivamente populados por elétrons via tunelamento ressonante.

(CNPQ, FAPESP)

## GROWTH AND CHARACTERIZATION OF OF InGaAs QUANTUM DOTS BY MOLECULAR BEAM EPITAXY

A. S. Ferlauto and A. A. Quivy

Universidade de Sao Paulo, Instituto de Fisica, Laboratorio de Novos Materiais Semicondutores

**Palavras-chave:** Quantum Dots, Molecular Beam Epitaxy, InGaAs

For more than 20 years, molecular beam epitaxy (MBE) has been one of the best tools for producing 2D semiconductor systems (quantum wells, superlattices). However, lower dimensionality features (quantum wires and dots) were generally achieved by post-growth *ex-situ* nanolithography, as a consequence of the severe restriction for MBE growth. A few years ago, several groups pointed out a new way of producing *in-situ* quantum wires and dots, leading to a massive production of such systems. In this work we are reporting on the growth of InGaAs quantum dots self organized on GaAs substrate. Several sets of samples were grown, varying the growth temperature and the In content. Higher In concentrations yielded sharper 2D-3D RHEED transition (streaky to spotty pattern) that was much easier to detect than for lower In concentrations. However, for such high In contents, the growth temperature had to be lower down to 480 °C to avoid the use of a too high As flux and In re-evaporation. Each sample consisted of a 0.5  $\mu\text{m}$  GaAs buffer, a 60 Å of low In-content quantum well, a 1000 Å thick GaAs layer, a thin high In-content InGaAs layer, and a 300 Å thick GaAs cap layer. The 60 Å quantum well acted as a reference for photoluminescence measurements. The thickness of the second InGaAs layer was varied from one monolayer below the critical thickness up to one monolayer above the critical thickness. PL measurements showed a broad peak at higher energy (higher than expected for a quantum well of the same width), related to the formation of the quantum dots.

(CNPq, FAPESP)

## INVESTIGAÇÃO DOS CONTATOS EM FILMES DE $\text{SnO}_2$ CRESCIDOS A PARTIR DE SUSPENSÕES COLOIDAIS

Fábio R. Messias<sup>1</sup>, Luis V.A. Scalvi<sup>2</sup>, M. Siu Li<sup>1</sup>, Celso V. Santilli<sup>3</sup>, Sandra H. Pulcinelli<sup>3</sup>

1 - F.C.M., Instituto de Física de São Carlos - USP, C.P. 369, São Carlos SP 13560-970

2 - Dep. Física, UNESP - Campus Bauru, C.P. 473, Bauru SP 17033-360

3 - Inst. de Química, UNESP - Campus Araraquara, C.P. 355, Araraquara SP 14800-900

**Palavras-Chave :**  $\text{SnO}_2$ , semicondutores, contatos

Filmes de  $\text{SnO}_2$  depositados por dip-coating a partir de suspensões coloidais têm apresentado excelente transparência e uma tendência de melhora na condutividade elétrica quando dopados com Sb. Espera-se também um aumento no transporte para dopagem com Nb. Entre as aplicações deste semicondutor óxido degenerado, podemos destacar o uso como eletrodo transparente em dispositivos eletro-óticos e como refletor de calor em coletores solares. Para que se possa investigar as propriedades eletro-óticas de  $\text{SnO}_2$ , deve-se resolver o problema mais básico da confecção de contatos nessas amostras. A fabricação de contatos em semicondutores é ainda uma tarefa um tanto empírica, e assim nosso trabalho tem sido variar tipos de metais e tempos de tratamento térmico, com o objetivo de se propiciar a interação do metal com a superfície do semicondutor, e conseqüente melhora nas propriedades de condução elétrica através da interface. A modelagem do diagrama de bandas de energia perto da interface está em andamento e deverá fornecer subsídios para a confecção de contatos confiáveis em  $\text{SnO}_2$ . Neste trabalho são apresentados resultados de curvas corrente-voltagem em diversas temperaturas para contatos feitos por evaporação de In, submetido à diversos tratamentos térmicos diferentes, que mostram a melhora na qualidade dos contatos, se comparados com tinta de prata convencional. Esses resultados sugerem que o mecanismo de transporte através da interface é a difusão de In, que deve constituir uma fina camada altamente dopada próxima da interface e permitir o tunelamento dos portadores de carga. Apresentamos também resultados de absorção ótica, que confirmam aumento na absorção para baixos valores de comprimento de onda, em acordo com as referências que indicam bandgap superior a 3,5 eV. Medidas de fotocondutividade estão em andamento e deverão ser conclusivas para a compreensão da física do transporte elétrico nesta amostras e principalmente, para a potencial aplicação de  $\text{SnO}_2$  em dispositivos eletro-óticos. (CAPES, CNPq, FAPESP)

## ESTUDO DOS MECANISMOS DE TRANSPORTE EM CÉLULAS SOLARES

*Cristiano da Silva Pinto e Francisco das Chagas Marques*  
Instituto de Física, "Gleb Wataghin"  
Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP  
13081-970, Campinas, SP, Brasil

**Palavras-chave:** células solares, mecanismos de transporte, fator de idealidade.

As propriedades de transporte de células solares depende do processo de fabricação das mesmas. Em células solares de silício cristalino com junção p-n os principais mecanismos de condução são por difusão e recombinação. A faixa de predominância de cada um destes mecanismos depende basicamente das propriedades dos emissores e da passivação de sua superfície. Neste trabalho investigamos as propriedades fotovoltaicas básicas e os mecanismos de condução em células solares de silício monocristalino com emissores formados pela difusão de fósforo.

Os parâmetros elétricos analisados foram: tensão de circuito aberto, corrente de curto-circuito, fator de preenchimento, eficiência, fator de idealidade, corrente de saturação, resistências série e paralela. Para a realização destas medidas interfaceamos uma fonte de corrente-tensão, permitindo que todos os dados fossem calculados e tratados por softwares convencionais ou desenvolvidos localmente.

Os mecanismos de transporte foram determinados através das curvas de corrente versus tensão, no escuro e sob iluminação, obtidos em função da temperatura de caracterização. Este estudo foi realizado em função das espessuras dos emissores e de etapas de passivação da junção com os contatos metálicos e camada antirefletora. Além de investigar as características fundamentais de células solares, os resultados são muito úteis ao processo de otimização das células.

(Apoio: FAPESP, SCTDE(SP), E CNPq)

## ELETRONIC PROPERTIES AND WAVE PACKETS EVOLUTION IN SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE WITH TAMM-STATE

*Diógenes Bosquetti, Pierre Basmaji, Oscar Hipólito and Euclides Marega Jr.*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP

**Palavras-Chave:** wave packet, Bloch oscillations, Tamm-State.

The principal property of a periodic heterostructure is the fact that the wave function are delocalized, extending over the entire system, with the mini-bands formation analog as in bulk materials. The coupling degree depends strongly of effective mass, barrier thickness, well width and the external electric field. The last factor leads to the transition between extended to localized eigen-functions of the system, with the appearance of a ladder of quantum states, called Stark ladder.

When one well width is different to the others, a state with energy quite different to the mini-band energies is obtained in the heterostructure (Tamm-State). The energy difference induces a weak coupling to the others wells and the Tamm-state is always localized in that different well and do not participate the mini-band scheme, a zero electric field. If the electric field is take into account, a resonance condition of the Tamm-State and the first mini-band state can be obtained if these two energy levels have practically the same energy value. When it happens, wave packets constructed by these two states oscillates in the maximum amplitude through the system. Others states are still localized in this electric field value, having only one resonance state in the heterostructure.

In this work, we investigate the effect of an external field when applied in an periodic finite GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0.1 ≤ x ≤ 1) semiconductor heterostructure coupled with one Tamm-state induced by one well which width is different to the others. Using the Split-Operator method we simulated this system in different electric fields value and different temperature and aluminum concentrations. We also obtain the evolution of wave packets constructed by transition rate by optical excitements of split-off band.

(CNPq - FINEP - FAPESP)

## CAMPO DE TEMPERATURA EM DISPOSITIVOS MICROELETRÔNICOS OBTIDOS PELA MICROSCOPIA FOTOTÉRMICA

*J. A. Batista, A. M. Mansanares e E. C. da Silva*

Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física "Gleb Wataghin"  
Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

**Palavras-Chave:** Microscopia Fototérmica, MOSFET, mapas térmicos

Um importante passo para o desenvolvimento de estruturas microeletrônicas é a avaliação não-destrutiva de dispositivos em operação. O conhecimento das perdas térmicas nessas estruturas é de grande importância uma vez que, se elas forem excessivas localmente, podem indicar a presença de defeitos ou mesmo servir como fonte de propagação desses defeitos. Neste trabalho, a Microscopia Fototérmica é aplicada à caracterização de estruturas microeletrônicas. As estruturas utilizadas são trilhas de polissilício e transistores de efeito de campo - MOSFET, implementados em tecnologia CMOS/CMN 5 $\mu$ m n-well. A técnica é usada para obter informações acerca da distribuição de fontes de calor abaixo da superfície dos dispositivos. Para sondar a temperatura na amostra, um feixe de laser diodo (670nm) é focalizado sobre a sua superfície através de um microscópio. A varredura sobre a amostra é feita utilizando-se um sistema de translação x-y com deslocamentos mínimos de 100nm. O feixe refletido pela amostra é focalizado sobre um fotodetector, sendo o sinal obtido proporcional à temperatura. Os mapas térmicos mostram a distribuição de fontes de calor e são usados para revelar defeitos que perturbam o campo de temperatura. No caso de trilhas, o sinal é proporcional à densidade de corrente, indicando o domínio do efeito Joule. Em MOSFETs, os mapas revelam maiores perdas térmicas próximas ao dreno; isto está relacionado a alta resistência elétrica devido ao estrangulamento do canal. A técnica tem-se mostrado extremamente útil na avaliação não-destrutiva de dispositivos em operação, visto que qualquer defeito que perturbe o campo de temperatura, seja através de parâmetros térmicos ou de barreiras térmicas, podem ser facilmente detectados. Os autores são gratos a J. A. Pereira, M. B. C. Pimentel e N. Jannuzzi do CTI pelas amostras concedidas e discussões relevantes.

(FAPESP, CNPq, FINEP)

## ANÁLISE POR ESPECTROSCOPIA RAMAN DE GaAs IMPLANTADO COM Te E Mg

*Giovani Zanelatto, José Cláudio Galzerani, Denis L. P. Santos*  
Universidade Federal de São Carlos - Depto. de Física - São Carlos - SP

**Palavras-Chave:** Raman, semicondutor, desordem

A implantação iônica é uma técnica amplamente utilizada na execução de dopagens locais para a fabricação de dispositivos eletrônicos planares. A quantidade de defeitos produzidos no material implantado depende da massa e da energia do íon incidente, da taxa de dose utilizada e da densidade, temperatura e estrutura do cristal-alvo. Para doses maiores ou iguais a 10<sup>15</sup> íons/cm<sup>2</sup> a região implantada torna-se amorfa. A espectroscopia Raman é um método não-destrutivo bastante conveniente para se estudar o grau de desordem e natureza dos danos produzidos pela implantação; além disso, a técnica pode ser utilizada para analisar a evolução da recuperação da cristalinidade quando o material é submetido a tratamentos térmicos. Em conjunto com o modelo de Correlação Espacial de Richter pode-se obter as dimensões e geometria do volume de confinamento dos fônons.

Neste trabalho, substratos de GaAs [100] dopados com Si a 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup> foram submetidos a implantação de Te e Mg, fora da condição de "channeling", com doses de 10<sup>12</sup>, 10<sup>13</sup>, 10<sup>14</sup> e 10<sup>15</sup> íons/cm<sup>2</sup>. As implantações foram feitas com energias calculadas de modo a obter a máxima concentração de defeitos a uma profundidade de 500Å. As amostras foram clivadas e submetidas individualmente a recozimento sob fluxo constante de N<sub>2</sub> por 20 minutos a temperaturas variando de 150°C a 700°C. A análise dos espectros Raman (posições das linhas, alargamentos e assimetrias, em comparação com o caso do GaAs cristalino) mostrou que a técnica é muito sensível à dosagem das implantações, em comparação à técnica de RBS. Os ajustes destes espectros com a teoria de correlação mostraram que o comprimento de correlação (L) sempre cresce com o aumento da temperatura de recozimento, e decresce com a dose de implantação. Para as mesmas doses de implantação, L é sempre inferior no caso da implantação de Te (em comparação com o Mg). Foram feitos ajustes de curvas assumindo formatos esféricos ou de disco para os volumes de correlação. Verificou-se que para valores de L até 150Å, o formato que mais se ajusta é o de disco, enquanto que para L > 150Å, este passa a ser o esférico.

(CAPES, FAPESP, CNPq - RHAE)

## THERMAL MAPS OF OPERATING DIODE LASERS OBTAINED BY PHOTOTHERMAL MICROSCOPY

L. C. O. Dacal\*, A. M. Mansanares\*, E. C. da Silva\*  
R. B. Martins\*, A. C. Sachs\*

\*Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp  
Centro de Pesquisas e Desenvolvimento, CPqD, Telebrás

**Key words:** Diode laser, Photothermal Microscopy, Thermal Map

The temperature distribution during the laser diode operation is one of the critical parameters to its reliability. When the active layer becomes too hot one has instability problems. It occurs mainly when high output power is required during the laser operation. Therefore thermal maps can give valuable informations to the growth of the crystal and to improve its performance. In this work the studied samples are lasers fabricated at CPqD - Telebrás (Campinas, SP - Brazil) that are used as pumping sources in Er-doped fiber amplifiers (telecommunication systems). These samples are SQW InGaAs/GaAs lasers, ridge lateral confinement structures, with emission peak at 980 nm. We perform thermal maps using a probe laser ( $\lambda = 670$  nm) focused on the mirror face of an operating laser diode sample. The probe spot size is 1  $\mu\text{m}$ . The reflected light intensity is measured using a Si photodetector and a lock-in amplifier. The mirror face is scanned by moving the sample in two perpendicular directions with a minimum step size of 0.1  $\mu\text{m}$ . The oscillation in the reflected light intensity is related to the refractive index change due to the local temperature variation. The thermal maps obtained show clearly that this technique is very powerful for measurement of temperature distribution in microelectronics devices. The technique has a spatial resolution of the order of  $\mu\text{m}$  and as a non-destructive method it can be used to analyze sample under different conditions including close to real operation.

(CNPq)

## PROPRIEDADES TERMOMECÂNICAS DO CARBETO DE GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO

Rodrigo Gribel Lacerda, Johnny Vilcarromero Lopez e Francisco das Chagas Marques  
Universidade Estadual de Campinas - Unicamp - Instituto de Física "Gleb Wataghin" -  
Departamento de Física Aplicada

**Palavras-Chave:** carbeto de germânio, módulo de Young, stress

Neste trabalho realizamos um estudo das propriedades termomecânicas do carbeto de germânio amorfo hidrogenado. Este material, apesar de pouco investigado, tem aplicações potenciais em dispositivos eletrônicos. A compreensão de suas características também ajudará ao entendimento das estruturas amorfas envolvendo o carbono, que pode se apresentar com diferentes hibridizações. Os filmes foram preparados pela técnica de *rf sputtering*, utilizando um alvo composto por um disco de carbono com pedaços de germânio apoiados sobre ele, em atmosfera de argônio e hidrogênio. A concentração de carbono foi variada entre zero e cerca de 60 %. As propriedades termomecânicas foram obtidas através da medida do raio de curvatura do sistema filme/substrato que é determinado com um sistema óptico baseado no desvio de um feixe de laser de He-Ne refletido pela amostra. Observamos que o *stress* é do tipo compressivo para a maioria das amostras, mas diminui com o aumento do conteúdo de carbono nos filmes, chegando a *stress* tensivo em alguns casos. Este efeito está relacionado com a estrutura dos filmes, e pode fornecer indicações da hibridização do carbono nas ligas. A redução no *stress* está também relacionado com a criação de defeitos através da inclusão de átomos diferentes na rede do germânio. O módulo de Young e o coeficiente de dilatação térmica foram investigados em função do conteúdo de carbono.

(Apoio: CNPq e FAPESP)

## PROPRIEDADES DO CARBETO DE GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO (a-GeC<sub>x</sub>:H)

*J. Vilcarromero e F.C. Marques*  
Instituto de Física, "Gleb Wataghin"  
Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP  
13081-970, Campinas, SP, Brasil

*Palavras Chave:* semicondutores amorfos, carbeto de germânio, infravermelho

O interesse pelo desenvolvimento e estudo das propriedades optoeletrônicas e estruturais de ligas baseadas no germânio tem aumentado após o sucesso obtido na otimização de filmes de a-Ge:H. Com excessão das ligas de a-Si-Ge, a qual tem recebido muita atenção, há pouco estudo sobre outras ligas baseadas no germânio amorfo. Neste trabalho, apresentamos um estudo das propriedades ópticas e estruturais de filmes finos de carbeto de germânio amorfo hidrogenado preparados pela técnica de rf co-sputtering. Para a preparação deste filmes, usamos alvos compostos por um disco de grafite com pedaços de germânio colocados sobre ele, para a obtenção de filmes com concentrações de carbono variando desde zero até altos teores. Os filmes foram preparados em atmosfera de argônio e hidrogênio. A taxa de deposição dos filmes cai rapidamente quando aumentamos o conteúdo de carbono, o que limita a preparação de amostras com altos teores de carbono. Observamos que a incorporação de carbono na rede do germânio aumenta a banda proibida na faixa de concentração de carbono até cerca de 15 %, mantendo-se aproximadamente constante para concentrações de até 65 %. O índice de refração diminui na faixa de baixa concentração de carbono e se mantém constante nas concentrações maiores. Este comportamento está provavelmente relacionado com a hibridização do carbono. Um estudo sobre os modos vibracionais presentes nas ligas em função do conteúdo de carbono será apresentado. As propriedades das ligas de carbeto de germânio serão comparadas com os reportados para o carbeto de silício, que é um material amplamente estudado e de alto valor tecnológico.

(Apoio : CNPq e FAPESP)

## ESTUDOS FOTOACÚSTICO DE POLIFORMAS DE SiC

*A. C. de Oliveira, J.A. Freitas, Jr.††, and W.J. Moore‡*

\*Departamento de Física, Universidade de Brasília, DF 70910, BR

†Sachs/Freeman, Assoc., Landover, MD 20785, USA

‡Naval Research Laboratory, Washington, D.C. 20375, USA

*Palavras-Chaves:* foto-acústica, SiC,

Várias técnicas foram desenvolvidas nos últimos anos para a fabricação de filmes epitaxial e 'bulk' das várias poliformas de SiC. Esses desenvolvimentos reviverão as possibilidades de aplicações de sistemas de SiC em altas temperaturas, altas potências, e dispositivos eletrônicos de alta velocidade. Embora a condutividade térmica do SiC é um parâmetro importante para uma realização de seu potencial, as propriedades térmicas de SiC não foram ainda extensivamente estudadas. Nesse trabalho apresentamos o uso de espectroscopia foto-acústica, uma técnica térmica sem contato, para monitorar as propriedades óticas e térmicas de alguns dos politipos de SiC.

Espectroscopia foto-acústica atingiu grande desenvolvimento nas últimas duas décadas, e tem sido aplicada com sucesso em amostras supercondutoras quer em pó, amostras não polidas, cristalinas, filmes finos cristalinos ou amorfos, estruturas multicamadas, etc.. Uma das principais vantagens de espectroscopia foto-acustica sobre outras técnicas óticas, isto é absorção ótica, é que produz um espectro semelhante, e pode fornecer informações direta de processos de recombinação não radiativo e, conseqüentemente, complementa a absorção e a espectroscopia potoluminescência. No presente trabalho comparamos a absorção ótica e espectros foto-acústicos dos politipos 3C-, 4H-, 6H-, e 15R-SiC.

Tiramos o espectro foto-acústico e transmissão de amostras de 3C-, 4H-, 6H-, e 15R-SiC, medida na vizinhança do 'gap' de energia. O experimento foi feito a temperatura ambiente com uma montagem experimental padrão. A espessura das amostras de 3C-, 4H-, e 15R-SiC foram respectivamente 667µm, 470µm, 495µm e 445µm. Uma comparação detalhada entre os espectros de espectroscopia foto-acústica e transmissão de cada amostras mostrou que eles são similares em cada das características.

(FAP-DF, CNPq)

## RAMAN ANALYSIS OF ALLOYING EFFECTS ON CRITICAL LAYER THICKNESS IN $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ HETEROSTRUCTURES

*P.S.Pizani<sup>a</sup>, R.Carles<sup>b</sup>, G.Landt<sup>b</sup> and M.Gendry<sup>c</sup>*

- a) Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, SP, Brasil  
b) Laboratoire de Physique des Solides, Université Paul Sabatier, Toulouse, France  
c) Laboratoire d'Electronique, Ecole Centrale de Lyon, France

**Keywords :** Raman, strain relaxation, critical thickness.

Raman scattering has been used to analyse the alloying effect on strain relaxation and to estimate the critical layer thickness in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  layers grown by MBE on  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$  [001]-oriented substrate. The samples were grown for  $x$  ranging from 0.00 to 1.00, for two different thickness. In these heterostructures the layers are submitted to compressive strains for  $x > 0.53$  and to tensile strains for  $x < 0.53$ , combined with chemical and structural disorder. From the analysis of the LO GaAs-like phonon frequencies as a function of layer thickness it was possible to estimate the critical layer thickness  $t_c$  as a function of indium content. The comparison of the results with the Energy Balance Model (EBM) and the Force Balance Model (FBM) indicated that the experimental values of  $t_c$  are greater than the theoretical predictions for both models for indium contents smaller than 0.53 ("GaAs side"), while for the "InAs side" ( $x > 0.53$ )  $t_c$  follows approximately the EBM model. The analysis of the full width at half maximum (fwhm) of the LO GaAs-like phonon Raman peak as a function of indium contents showed larger broadenings for layers with  $x \sim 0.4$  and  $0.85$  and smaller broadenings for  $x \sim 0.00$  and  $0.53$ . The results lead to the conclusion that the lattice mismatch is not the only factor to determine the crystalline quality of the layer and the critical layer thickness; the indium / gallium ratio contents have an important role in this system.

## Análise de deformações em camadas de $\text{BaF}_2/\text{CaF}_2$ crescidas sobre Si(111) por MBE

E. Abramof, S.O. Ferreira, P.H.O. Rappl, H. Closs, C. Boschetti, I.N. Bandeira

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE. Laboratório Associado de Sensores e Materiais- LAS. CP 515 - São José dos Campos - SP. [abramof@las.inpe.br](mailto:abramof@las.inpe.br)

**Palavras-Chave:** fluoretos, crescimento epitaxial, deformações, difração de raios-x

Camadas epitaxiais de fluoretos II-a (como  $\text{BaF}_2$  e  $\text{CaF}_2$ ) tem sido utilizadas como camadas "buffer" no crescimento de compostos semicondutores IV-VI sobre silício. Estas camadas tem a função de fazer o casamento entre os parâmetros de rede e os coeficientes de expansão térmica dos dois materiais. O  $\text{CaF}_2$  é escolhido como primeira camada pois a sua constante de rede (5.46 Å) é bem próxima a do Si (5.43 Å) enquanto a do  $\text{BaF}_2$  (6.20 Å) se aproxima da dos compostos IV-VI (~6.46 Å). Neste trabalho apresentamos um estudo das deformações na camada de  $\text{BaF}_2$  na estrutura  $\text{BaF}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$  através da técnica de difração de raios-x, visando uma otimização estrutural destas camadas "buffer". As camadas de  $\text{CaF}_2$  e  $\text{BaF}_2$  foram crescidas a partir de células de efusão térmica em um sistema de epitaxia de feixe molecular (MBE - Riber 32 P) com uma pressão de fundo de  $1 \times 10^{-10}$  Torr. Os crescimentos foram monitorados "in situ" por difração de elétrons-RHEED. Depois da desorção do óxido de Si a 900°C, a camada de  $\text{CaF}_2$  foi crescida a 700°C sempre com uma espessura de 8 nm. As camadas de  $\text{BaF}_2$  foram crescidas a diferentes temperaturas e espessuras e caracterizadas estruturalmente através da difração de raios-x. Observou-se uma deformação de estiramento no plano das camadas de  $\text{BaF}_2$  dependente da temperatura de crescimento e da espessura da camada. Deformações compressivas no plano das camadas seriam esperadas devido ao maior parâmetro de rede dos fluoretos em relação ao Si. A deformação de estiramento pode ser explicada se a grande diferença entre os coeficientes de expansão térmica do Si ( $2.6 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ ) e dos fluoretos ( $\sim 19 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ ) for levada em consideração durante o resfriamento para a temperatura ambiente. A magnitude dessa deformação depende, portanto, da temperatura de crescimento; e a relaxação da deformação, que se dá através da acomodação de dislocações durante o resfriamento, depende da espessura da camada.

## EFICIÊNCIA DINÂMICA DE COLEÇÃO DE PORTADORES MINORITÁRIOS EM CÉLULAS SOLARES DE SILÍCIO MONOCRISTALINO

*Paulo Nubile e Antônio Fernando Beloto*

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - SP

Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS

12201-970 São José dos Campos, SP, nubile@las.inpe.br

**Palavras-Chave:** células solares, silício, resposta espectral

A eficiência dinâmica de coleção de portadores minoritários em células solares ou dispositivos de junção pn determina a razão de portadores fotogerados pelo número de fótons incidentes numa determinada posição no interior do dispositivo. É uma medida da qualidade das diversas partes que o compõem. Para determinar a eficiência de coleção parte-se de uma medida de resposta espectral convencional, de 300 nm a 1100 nm. Divide-se o dispositivo em  $n$  camadas, sendo que  $n$  deve ser menor do que o número de pontos de medida da resposta espectral, utiliza-se um modelo óptico para calcular a incidência de fótons em cada camada e determina-se uma equação matricial do tipo  $[SR]=[\Phi][D]$ , onde  $SR$  é a matriz de resposta espectral,  $\Phi$  é a matriz de densidade integrada de fótons e  $D$  é a matriz da eficiência de coleção, que é calculada com a ajuda de da rotina SVD (Singular Value Decomposition). Este trabalho estuda a eficiência de coleção em células solares de qualificação espacial de silício monocristalino. A influência da profundidade da junção, da profundidade do campo retrossuperficial, das dopagens de base e de emissor e das diferentes passivações na superfície são estudadas através dos perfis de eficiência de coleção obtidos. Os perfis obtidos são comparados com outras técnicas de caracterização além da resposta espectral, como as medidas de corrente em função da tensão sob iluminação e no escuro.

## GROWTH OF Si $\delta$ -DOPING SUPERLATTICE IN GaAs

*A. P. Lima, A. A. Quivy, J. R. Leite and M. A. A. Pudenzi\**

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Laboratório de Novos Materiais Semicondutores

\*Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Laboratório de Pesquisa em Dispositivos

**Palavras-chave:** Molecular Beam Epitaxy, Delta doping, Superlattice

Semiconductor superlattices have always attracted physicist because of their peculiar band-structure properties. On a growth point of view, high-quality compositional superlattices are quite difficult to achieve as a result of interface roughness. For a long time, many groups tried to point out experimentally the plateau-like behaviour of the conductivity, perpendicularly to the growth direction, as a function of the Fermi Energy, without any success. Recently, Enderlein *et al.* predicted that the same behaviour should also be observed in  $\delta$ -doping superlattices. With this objective in mind, we grew a set of 10 samples by molecular beam epitaxy. All the samples had exactly the same structure and composition, excepted for the planar concentration of Si that was varied, from sample to sample, from  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  up to  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Each sample consisted of a  $0.5 \mu\text{m}$  GaAs buffer grown at  $610^\circ\text{C}$ , and 50  $\delta$ -doped Si planes separated by a  $300 \text{ \AA}$  thick GaAs layer. A  $300 \text{ \AA}$  thick GaAs cap layer was grown on top of the last Si plane. The whole structure ( $\delta$ -doped Si planes + GaAs layers) were grown at  $550^\circ\text{C}$ . This temperature has been shown to be low enough to minimize the dopant diffusion, and high enough to produce sample with good optical properties. Secondary ion mass spectroscopy (SIMS) and photoluminescence (PL) measurements showed that our samples were of excellent quality.

(CNPq)

## GROWTH AND CHARACTERIZATION OF DISTRIBUTED BRAGG REFLECTORS (DBRs) FOR THE FABRICATION OF OPTICAL DEVICES.

A. L. Sperandio and A. A. Quivy

Universidade de Sao Paulo, Instituto de Fisica, Laboratorio de Novos Materiais Semicondutores

**Palavras-chave:** Micro Laser, Distributed Bragg Reflector, AlAs/AlGaAs Superlattices

Nowadays, Fabry-Perot Resonators are the basis of several new optoelectronic devices as micro-cavity lasers, light emitting diodes and several non-linear switches. However, the main problem for obtaining high-quality cavities is the fabrication of the 2 high-reflexion mirrors (DBRs). To achieve a high reflectivity, tens of layers, with different materials and composition, must be grown without any change of the other parameters during the whole growth, that can last up to 10 hours. Molecular beam epitaxy (MBE) is for sure one of the best techniques for growing these structures as it provides samples with very sharp interfaces and with highly precise control of the composition and thickness of the deposited layers. In this work, we are reporting on the growth and characterization of DBRs made of AlAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As superlattices. Ten pairs of AlAs and Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub> layers, 698 Å and 596 Å thick respectively, were grown on top of a 0.5 µm thick GaAs buffer. The growth temperature was chosen to be 620 °C to minimize the roughness of AlAs layers. A growth interruption of 20 s and 40 s was realized at the normal and inverted interface respectively. The growth rate was 0.3 mono layer per second (ML/s) for AlAs and 1.0 ML/s for GaAs. Photoluminescence (PL) measurements showed that the sample was of good quality. The energy of the exciton-like transition is in good agreement with theoretical predictions for a quantum well of the same thickness. Reflectivity measurements are in progress to determine the width of the stop band of the DBR.

(CNPQ)

## MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA E TRANSMITÂNCIA ÓPTICA EM CRISTAIS DE IODETO DE CHUMBO CRESCIDOS PELO MÉTODO BRIDGMAN

N. Veissid e C. Y. An

Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS  
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE  
Fax: (0123) 41-1869, São José dos Campos - SP

**Palavras-chave:** semicondutor, detector, iodeto de chumbo

Atualmente, o iodeto de chumbo tem sido amplamente estudado tendo em vista à sua aplicação em detectores de radiação ionizante (raios X e gama) para operarem na temperatura ambiente. Ele apresenta vantagens, em relação ao iodeto de mercúrio, quanto à sua estabilidade e facilidade na fabricação do detector. O material de partida foi obtido por reação numa ampola de quartzo selada à vácuo, a partir de uma mistura estequiométrica de chumbo em pó (100 mesh) e iodo puro resublimado 3N da Merck. A ampola foi submetida à uma temperatura de 430°C durante 48 horas para obter-se um composto homogêneo. Em função da alta pressão de vapor do iodo, o forno foi aquecido muito lentamente (50°C/dia). Caso contrário, devido à energia exotérmica liberada existe a possibilidade de explosão. Dentro de uma outra ampola (10-8mm diâmetro, 200mm comprimento), de quartzo selada à vácuo e carregada com 10g de iodeto de chumbo obtido da reação, foi crescido o monocristal em um forno vertical pelo método Bridgman. O cristal obtido (30mm comprimento) tem o eixo *c* orientado perpendicularmente ao eixo de crescimento e foi clivado, na direção perpendicular ao eixo *c*, em espessuras variando de 0,1mm até 1 mm, com área de 0,5cm<sup>2</sup>. Medidas de transmitância óptica foram executadas em um espectrofotômetro, no intervalo de 190nm até 900nm. O ponto de inflexão da curva de transmitância permitiu calcular a largura da banda de energia proibida deste material ( $E_g=2,37\text{eV}$ ). Para a medida da resistividade elétrica, contatos de ouro em ambas as superfícies foram depositados por evaporação térmica. Esta medida foi feita usando a técnica de divisor de tensão (usando os valores de 10V e de 20V) e com variação de temperatura no intervalo de 10°C até 75°C. Em função da alta resistência da amostra, cuidados especiais foram tomados para compensar os efeitos das resistências paralelas. O ajuste da curva de resistividade em função da temperatura permitiu determinar a energia de ativação térmica ( $189\pm 15\text{meV}$ ) e também estimar  $E_g\approx 2\text{eV}$ . A resistividade do iodeto de chumbo na temperatura ambiente apresenta o valor de  $1,8\times 10^{10}\Omega\text{cm}$ .

## PROJETO E CONSTRUÇÃO DE UM SISTEMA DE VÁCUO PARA USO EM ESPECTROSCOPIA DE MASSA DE PARTÍCULAS IONIZADAS (SIMS)

*M. Francescini, C. A. de Souza, H. Arakaki, Pierre Basmaji e E. Marega Jr.*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

**Palavras-Chave:** vácuo, superfície, SIMS

As técnicas de espectroscopia do elétron tem dominado a análise superficial e quase superficial durante o período desde a metade dos anos 60. Em particular a espectroscopia de foto-elétron de raio-x (XPS) e a espectroscopia Auger (AES) têm sido extensamente utilizadas, sendo XPS a técnica mais utilizada para análise elementar quantitativa acima de 0,1% de um nível de mono-camada.

Essas duas técnicas empregam a excitação do elétron na estrutura, mas esse por sua vez pode penetrar muito pouco na amostra estudada impossibilitando assim uma análise de camadas mais profundas do material. A técnica de espectroscopia de massa de partículas ionizadas (Secondary ion mass spectroscopy-SIMS), pode proporcionar informações sobre a estrutura de camadas mais profundas, fornecendo informações precisas sobre a composição da amostra em análise.

Neste trabalho apresentamos o projeto e desenvolvimento de um sistema de alto-vácuo dedicado à técnica de espectroscopia de massa de partículas para aplicação no estudo de filmes semicondutores do grupo III-V crescidos por MBE (epitaxia por feixe molecular). Foram utilizados um espectrômetro de massa SQ-300(VG) e um canhão de íons EX05(VG). A performance do sistema como um todo foi testada e comparada com resultados obtidos em sistemas comerciais.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## SISTEMA AUTOMATIZADO DE MEDIDA DE EFEITO HALL PARA CARACTERIZAÇÃO DE SEMICONDUTORES

*Clóvis E. M. de Oliveira e Mauro M. G. de Carvalho*  
UNICAMP - Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Departamento de Física Aplicada -  
Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD)

**Palavras-Chave:** automatização, efeito hall, semicondutores

A medida de densidade e mobilidade de portadores e resistividade de substratos ou camadas epitaxiais é obrigatória para a caracterização elétrica de amostras semicondutoras. Em linhas gerais, para realização desta medida são necessários pelo menos quatro contatos ôhmicos na amostra a ser caracterizada. A amostra é então submetida a um campo magnético perpendicular à sua superfície e, por dois de seus contatos, é aplicada uma corrente elétrica que resulta numa tensão elétrica entre os outros dois contatos, chamada de tensão Hall. Um sistema de medidas convencional constitui-se de uma fonte de corrente, um milivoltímetro, um eletroímã e um conjunto de chaves através do qual o usuário seleciona em quais contatos passa a corrente e em quais é medida a tensão e ainda comandos para ligar/inverter/desligar o campo magnético. Depois da etapa de medidas segue-se a de cálculos para caracterização da amostra. O sistema de medidas automatizado apresentado neste trabalho está baseado em uma interface que possui um conjunto de relés e um conversor A/D de 12 bits encarregada da comutação dos contatos, o controle do eletroímã e da aquisição da tensão Hall ficando os cálculos por conta do microcomputador. A caracterização de uma amostra utilizando este sistema demora alguns minutos, sendo que os cálculos possuem grande confiabilidade e, para evitar os possíveis problemas de conexões defeituosas e maus contatos elétricos, o sistema pode ser testado no início de cada série de medidas com auxílio de uma "amostra padrão", cujas características são conhecidas. Amostras semicondutoras de InP com densidade de portadores variando entre  $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$  e  $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  são caracterizadas rotineiramente no LPD utilizando este sistema. Detalhes do *hardware* e do *software* da interface serão apresentados neste trabalho.

(FINEP-PADCT2, CNPq-RHAE)

## PROJETO E MONTAGEM DE UMA PLACA PARA AQUISIÇÃO E SAÍDA DE DADOS EXPERIMENTAIS

*Machado, R. G.; Dantas, N. O.; Stabile, M. A.; Hayashida, R.; Omena, H. A.*

Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia

Laboratório de Novos Materiais Isolantes e Semicondutores (LNMIS)

Caixa Postal 593, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil

*Palavras-chave:* aquisição, controle, conversão

Foi projetada e montada uma placa universal para aquisição de dados experimentais no LNMIS. Essa placa foi testada em um forno de alta temperatura para controle de suas taxas de aquecimento, e em um futuro próximo será utilizada, também, em técnicas físicas de termoluminescência e fotoluminescência para caracterização de materiais isolantes e semicondutores, respectivamente. A placa é composta pelas seguintes unidades descritas a seguir: estágio de entrada onde há uma entrada digital de 16 bits e um amplificador independente para cada uma das oito entradas analógicas para torná-las compatíveis, mediante ajustes em "trim pots", à amplitude de voltagem do conversor, seguido de um multiplexador com a função de introduzir os sinais em ordem sequencial e repetitiva no conversor A/D da linha ADS78 de 12 bits. A saída digital deste conversor é conectada ao circuito integrado 8255 (porta paralela programável) ligado ao "bus" de um microcomputador compatível IBM-PC onde depois de analisada e controlada por um "software", resulta em informações transmitidas por uma saída do CI 8255, também de 12 bits, de volta à placa, chegando aos circuitos integrados "latches" que armazenam as palavras digitais para as duas saídas. O controle realizado nos "latches" ocasiona a demultiplexação das informações que seguem para os dois conversores D/A independentes da linha DAC78 de 12 bits. Os sinais analógicos de saída do conversor estão disponíveis através de conectores externos próprios. Há também uma saída digital de 16 bits.

(CNPq / FAPEMIG)

## TRANSIENTES DE TRANSPORTE EM p-GaAs SUBMETIDO A CAMPOS ELÉTRICOS INTENSOS

*E. W. S. Caetano, E. A. Mendes, e V. N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030

Campus do Pici, 60455-760 Fortaleza, Ceará

*Palavras-Chave:* transientes, transporte, p-GaAs

O estudo de fenômenos de transporte de portadores minoritários em semicondutores dopados tem considerável importância para o *design* de transistores bipolares. Investigações teóricas e experimentais das propriedades de transporte em semicondutores dopados foram realizadas para o estado estacionário ou campos elétricos fracos. Devido à redução das dimensões características de dispositivos semicondutores que têm sido realizadas, regimes transientes começam a ter importância para o seu regime de operação. Neste trabalho estudamos os transientes de transporte de portadores majoritários e minoritários em p-GaAs submetido a campos elétricos intensos. Dopagens de  $1.5 \times 10^{17}$ ,  $1.5 \times 10^{18}$ , e  $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  são consideradas. As equações para a energia e velocidade de arraste dos portadores são obtidas a partir da equação de Boltzmann na aproximação de tempos de relaxação para momentum e energia [1]. Demonstra-se que para um dado campo elétrico aplicado, a velocidade e a temperatura dos portadores majoritários é sempre mais elevada do que aquela dos portadores minoritários. Ocorre a existência de *overshoot* na velocidade em função do tipo de portador e da intensidade do campo elétrico aplicado. Para um campo de 5 kV/cm, a velocidade dos portadores majoritários (minoritários) apresenta (não apresenta) *overshoot*, uma consequência dos tipos dominantes de espalhamento dos portadores. Em geral, o *overshoot* para a velocidade dos portadores majoritários é sempre maior do que aqueles dos portadores minoritários. Finalmente, o regime transiente de transporte para os portadores minoritários é mais curto do que para os portadores majoritários, embora para as densidades e campos investigados (1-10 kV/cm) ambos sejam inferiores a 5 ps.

[1] A. M. Alencar, F. A. S. Nobre, A. J. C. Sampaio, and V. N. Freire, *Appl. Phys. Lett.* 59, 558 (1991).

## OTIMIZAÇÃO DE CÉLULAS SOLARES DE SILÍCIO CRISTALINO COM PROCESSOS SIMPLES

*Jorge Urdanivia Espinoza e Francisco das Chagas Marques*

Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP  
P.O. Box. 6165, 13081-970 - Campinas, SP - BRAZIL

Células solares de silício cristalino tem sido fabricadas com eficiências acima de 20%. Entretanto, sua fabricação envolve tecnologia avançada, como o uso de várias etapas de fotolitografia e componentes químicos de grau eletrônico. Neste trabalho mostramos que é possível atingir eficiências acima de 15% utilizando processos simples e componentes químicos de grau analítico.

Os principais aspectos do processo são: a) difusão de fósforo convencional para a formação dos emissores (será discutido a influência da resistividade de folha na eficiência das células); b) Deposição de contatos finos, da ordem de 20 micros de largura, para reduzir a resistência série e a cobertura metálica sobre a superfície frontal das células. A utilização de contatos finos é fundamental para se atingir eficiências superiores a 15%. Para isto utilizamos o método *lift-off*. Este método envolve o uso de apenas uma máscara, e pode ser implementado utilizando uma lâmpada comum de mercúrio. Isto elimina o uso das fotoalinhadoras de máscaras, que são aparelhos caros e de manipulação trabalhosa; c) Formação de *back surface field* através de liga do silício com alumínio; d) Camada antirefletora depositada por *spray* químico, sobre a superfície texturizada da células. A vantagem deste método sobre a evaporação convencional, é que o filme é depositado em uma chapa quente comum, sem necessidade de sistema de vácuo. O processo adotado produziu células de cerca de 16% de eficiência.

(Apoio: FAPESP, SCTDE (SP), and CNPq)

## "TOTAL ENERGY CALCULATIONS OF $\beta$ -GaN EPITAXIAL LAYERS GROWN ON Si- AND C- TERMINATED $\beta$ -SiC SUBSTRATES"

*L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, R. Enderlein, and J. R. Leite*

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Caixa Postal 66318, 05389-970 São Paulo, SP, Brasil  
*A. Josiek*

Université Bordeaux, Laboratoire des Composites Thermostructuraux, Domaine Universitaire-3,  
33600 Pessac, France

*D. Schikora*

Universität/ GH Paderborn, FB 6 Physik, Warburger Str. 100, 33098 Paderborn, Germany

**Palavras-Chave:** growth of  $\beta$ -GaN on  $\beta$ -SiC, surface reconstruction, total energy calculations

Recently, epitaxial layers of cubic ( $\beta$ -)GaN have been successfully grown on several substrates such as GaAs (100), Si (100), and cubic ( $\beta$ -)SiC(100). Hitherto, it seems that  $\beta$ -SiC is the most suitable substrate, since the lattice mismatch with zinc-blende GaN is lower than 4%. In this work, we perform a systematic theoretical investigation of the epitaxial layer growth of  $\beta$ -GaN on Si- and C-terminated  $\beta$ -SiC. We employ a self-consistent tight-binding total energy calculation method to study the deposition of a few layers of cubic GaN on SiC(100), taking into account surface reconstruction, epitaxial layer atoms relaxations and interface mixing. We adopted 2x2 supercells in which the total number of atoms varies from 40 to 52. Cohesion energies, atomic displacements, dangling bond occupancies, and surface reconstructions are calculated for a variety of epilayer systems. These include monolayers of Ga or N, single and double bilayers of GaN, on C- and Si- terminated substrate surfaces, and 50% interface mixing of the first deposited epilayer with the first layer of the substrate. Depending on the system, surface atoms dimerize symmetric or asymmetrically, leading to 2x1, 2x2 or c(2x2) surface reconstructions. At the substrate interface with the first epitaxial layer, it is found that N binds stronger than Ga, both to Si and C. Interface mixing is found to be energetically not favorable for both C- and Si- terminated substrates, although for this latter the obtained small energy differences may suggest the possibility of some mixing.

## CÁLCULO DE NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS QUÂNTICOS APLICADO AO ESTUDO DE UNIFORMIDADE DE ESPESSURA DE CAMADAS CRESCIDAS POR MOCVD

A.M. Machado, M.S.S. Loural, W. Carvalho Jr, A.C. Lamas  
CPqD-TELEBRÁS, Campinas - SP.

*Palavras-chave:* semicondutores III-V, poços quânticos, epitaxia, mocvd.

Empregando-se teorias básicas da Mecânica Quântica e da Física do Estado Sólido e métodos simples de caracterização como fotoluminescência (FL) e difração de raios-X (RX) com duplo cristal, é possível analisar a qualidade óptica e cristalográfica do material semicondutor crescido epitaxialmente. Mapeamento por FL em amostras crescidas sobre substrato de 2 polegadas de diâmetro permitem a análise da uniformidade de composição e espessura das ligas. Amostras projetadas especificamente para caracterização de heteroestruturas quânticas InP/InGaAsP/InGaAs emitindo em torno de 1,3 e 1,55  $\mu\text{m}$  a 300K, foram crescidas por MOCVD sobre substratos de InP.

Medidas de difração de RX forneceram a diferença de parâmetro de rede entre cada liga e o substrato de InP, permitindo o cálculo das energias de banda proibida modificadas pelas tensões provocadas por estes descasamentos.

Análises por FL forneceram os picos de emissão de cada liga ( $E_G$ ) e da emissão do poço ( $h\nu_{QW}$ ) formado por estas ligas. Gráficos teóricos de ( $E_{QW} - E_G$ ) em função da largura do poço ( $L_z$ ) foram feitos utilizando o modelo da função envelope para poços retangulares e incluindo a modificação das bandas de condução e valência devido à tensão. A diferença ( $h\nu_{QW} - E_G$ ) medida experimentalmente por FL pode ser ajustada ao gráfico teórico ( $E_{QW} - E_G$ )  $\times L_z$ , fornecendo diretamente  $L_z$ . Mapeamentos espectrais com medidas a cada 5mm foram feitos nos cristais crescidos, totalizando 63 pontos de medida por amostra. Os resultados mostraram materiais, ligas e heteroestruturas quânticas de excelente qualidade. Foram obtidos  $L_z = (90 \pm 2,3)\text{Å}$ ,  $L_z = (42 \pm 1,1)\text{Å}$  e  $L_z = (42 \pm 1,3)\text{Å}$  para poços de InGaAs/InP, InGaAsP/InP e InGaAs/InGaAsP, respectivamente. Para todos os materiais o desvio padrão em  $L_z$  mostra que a variação de espessura nos poços quânticos ao longo da superfície de 2" de diâmetro é da ordem de uma monocamada.

(Apoio do PADCT Novos Materiais-FINEP)

## SÍNTESE DE InP PELO MÉTODO DE SÍNTESE POR DIFUSÃO DE SOLUTO (SSD) UTILIZANDO CADINHOS DE CARBONO-VÍTREO

Claudio Ronald Miskys, Clóvis E. M. de Oliveira,  
Mauro M. G. de Carvalho, Márcio A. A. Pudenzi  
UNICAMP - IFGW - DFA / Laboratório de Pesquisa em Dispositivos

*Palavras-chave:* síntese de InP, cadinhos, carbono-vitreo

Foi desenvolvido um sistema para síntese de Fosfeto de Índio (InP) pelo método de Síntese por Difusão de Solutos (*Synthesis, Solute Diffusion - SSD*). Este sistema fornece tarugos de InP de alta pureza com baixa concentração de portadores ( $3 \times 10^{14}$  a  $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) para serem utilizados em posterior crescimento monocristalino pelo método Czochralski com encapsulamento líquido (LEC). Em nosso trabalho a síntese é usualmente feita em cadinhos de quartzo, mas como a superfície reage com a solução de In-P frequentemente o cadinho se quebra durante o resfriamento do forno no final do processo. Ocorre ainda a contaminação do cristal pelo Si dado que a impureza doadora dominante em crescimentos por SSD é identificada como sendo o próprio Si em medidas de fotocondutividade no infravermelho. Outros autores sintetizaram InP de alta pureza ( $N_D - N_A = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) utilizando cadinhos de Nitreto de Boro Piroclítico (PBN), entretanto, seu custo é muito mais elevado. Carbono-vitreoso é um material refratário com baixa pressão de vapor, moldável em várias formas e tamanhos além de ser reutilizável após a síntese devido a não aderência do InP nas paredes do cadinho. Medidas de caracterização elétrica mostraram que a concentração de portadores residuais é da ordem de  $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Estes resultados são comparáveis com os obtidos utilizando cadinhos de quartzo. A caracterização via SIMS (*Secondary Ion Mass Spectroscopy*) nos fornece ainda os traços de Si e C existentes nos cristais crescidos nestes dois materiais. As características descritas indicam o carbono-vitreoso como uma interessante alternativa em comparação com o quartzo e PBN no crescimento de InP de alta pureza para que posteriormente lâminas ótimas para o desenvolvimento de dispositivos possam ser obtidas.

(FINEP/PADCT2, CAPES)

## CRESCIMENTO DE MONOCRISTAIS DE FOSFETO DE ÍNDIO (InP) UTILIZANDO-SE CADINHOS DE QUARTZO, PBN E CARBONO-VÍTREO

Clóvis E. M. de Oliveira, Cláudio R. Miskys, Márcio A. Pudenzi e Mauro M. G. de Carvalho  
UNICAMP - Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Departamento de Física Aplicada -  
Laboratório de Pesquisa em Dispositivos (LPD)

*Palavras-Chave:* InP, LEC, cadinhos

Lâminas monocristalinas de Fosfeto de Índio (InP) são de fundamental importância para a pesquisa em dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos construídos a partir de crescimentos epitaxiais de ligas ternárias e quaternárias de compostos III-V, pois servem de substratos para estas epitaxias. O método mais utilizado comercialmente para o crescimento de monocristais de InP é o LEC (*Liquid Encapsulated Czochralski*), com o qual é possível o crescimento de tarugos monocristalinos de até 75 mm de diâmetro. O material mais utilizado para os cadinhos de crescimento é o Quartzo, devido a sua alta pureza e baixo custo, todavia ao final de cada crescimento o cadinho se quebra, sendo inviável a sua reutilização. Neste trabalho, utilizamos cadinhos de Quartzo, Nitreto de Boro Piro-lítico (PBN) e Carbono-Vítreo para crescer tarugos de InP não dopados intencionalmente, orientados na direção  $\langle 100 \rangle$  e com 30mm de diâmetro. Os cadinhos de PBN e Carbono-Vítreo podem ser reaproveitados, o que constituiu a motivação principal deste trabalho. A caracterização das lâminas monocristalinas foi feita utilizando-se medidas de Efeito Hall a 300K e 77K, de SIMS (*Secondary Ion Mass Spectroscopy*) e de EPD (*Etch Pit Density*). A densidade de portadores residuais medida a 300K para tarugos crescidos em cadinho de Carbono-Vítreo foi de  $1,0 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , para cadinho de Quartzo foi de  $4,1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$  e para cadinho de PBN foi de  $3,3 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ , o que mostra que os três tipos de cadinho podem ser utilizados em crescimentos LEC. Detalhes da técnica de preparação dos materiais iniciais e do crescimento dos tarugos serão apresentados neste trabalho, bem como das técnicas de caracterização e de seus resultados, apontando as vantagens e desvantagens de cada tipo de cadinho utilizado.

(FINEP-PADCT2, CNPq-RHAE)

## ESTUDOS DE INTERFACES EM ESTRUTURAS InP/InGaAs, CRESCIDAS POR MOCVD, USANDO DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DE ALTA RESOLUÇÃO

W. Carvalho Jr, A.M. Machado, C.F. Souza, A.C. Lamas, M.S. Loural, F. Iikawa\*  
Centro de Pesquisa e Desenvolvimento - TELEBRÁS, Campinas-SP  
\* - Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Campinas-SP

*Palavras-Chave:* Crescimento, difração de raios-X, interfaces

Estruturas periódicas formadas por camadas de InP/InGaAs, crescidas por MOCVD, foram analisadas por difratometria de duplo cristal. Usando um modelo cinemático de difração de raios-X, é possível simular o espectro de difração, e a partir daí, obter as espessuras e composições das camadas que formam a heteroestrutura. O objetivo deste trabalho é estudar as interfaces nas heteroestruturas, correlacionando suas alterações com as condições de chaveamento (interrupção) de gases usadas. Os espectros de difração de raios-X mostraram um grande número de satélites, modulados por um envelope, que é função das espessuras e da tensão mecânica das camadas que formam a estrutura. As medidas foram efetuadas usando radiação de  $\text{CuK}\alpha_1$ , nas reflexões (400) e (200). As amostras eram compostas por 20 períodos de InP/InGaAs, com espessuras nominais de 160 e 80 Å respectivamente. Ciclos de interrupção de 2 segundos, em ambiente de  $\text{H}_2$ ,  $\text{PH}_3$  e  $\text{AsH}_3$ , foram efetuados, separadamente em cada interface. Camadas de transição, com espessuras da ordem de 3 a 4 monocamadas atômicas (9 a 12 Å), foram inferidas através de simulações. Observou-se que na interface InP/InGaAs há uma camada de transição tensionada de InAsP, enquanto que na interface InGaAs/InP há uma camada tensionada de InGaAsP. Interrupções em ambiente de  $\text{AsH}_3$  provocam o aumento na composição de As em ambas as interfaces. Interrupções em  $\text{PH}_3$  reduzem a concentração de As, mas degradam a interface (aumento/distorção na largura dos satélites). Interrupção em  $\text{H}_2$  praticamente não altera as interfaces. Na interface InP/InGaAs, a formação da camada de InAsP pode ser explicada como sendo a substituição de átomos de P por As, devido à alta pressão de vapor do P no InP e também devido ao alto coeficiente de agregação do As. Na interface InGaAs/InP, a camada de InGaAsP é formada devido ao conhecido Efeito Memória de As e Ga, onde resíduos desses elementos ficam presos nas tubulações e nas paredes do reator, sendo lentamente liberados e incorporados na camada que está sendo crescida.

(Apoio FINEP-PADCT/Novos Materiais)

## CARACTERIZAÇÃO DE CAMADA DE InGaAs/InP, CRESCIDAS POR MOCVD, USANDO DIFRAÇÃO DE RAIOS-X E FOTOLUMINESCÊNCIA

M. S. S. Loural, W. Carvalho Jr, A. M. Machado, C. F. Souza, A.C. Lamas, F. Iikawa\*

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento - TELEBRÁS - Campinas, SP

\* - Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP - Campinas, SP

*Palavras-chave: Fotoluminescência, Camadas tensionadas, MOCVD, semicondutores III-V*

O crescimento de camadas de InGaAs de alta qualidade óptica e estrutural é fundamental para a fabricação de dispositivos de alto desempenho. Neste trabalho foram analisadas camadas de InGaAs/InP, com espessuras da ordem de 4000Å, crescidas por MOCVD. As camadas foram analisadas por difração de raios-X de alta resolução e fotoluminescência (PL). Sob o ponto de vista de estrutura cristalina, os espectros de difração mostraram alta qualidade do material, indicada pela presença de franjas de interferência ao redor do pico. O descasamento do parâmetro de rede variou entre  $+1 \times 10^{-3}$  e  $-3.5 \times 10^{-3}$ . Medidas de PL em função da temperatura, entre 2 e 90K mostraram a presença de um pico muito estreito (1,5meV), a 2K. Com a variação de temperatura, um segundo pico de energia mais alta começou a surgir, de forma que, em torno da temperatura do nitrogênio líquido os dois eram competitivos. A temperaturas altas, perto da ambiente, esses picos já estão convoluídos. Neste trabalho mostramos que o pico duplo a 77K é devido à deformação da rede do InGaAs provocada pela tensão mecânica proveniente do descasamento do parâmetro de rede da camada em relação ao do substrato. Como é bastante conhecido<sup>1</sup>, a tensão provoca o levantamento da degenerescência das bandas de buracos leves e pesados em  $k=0$ . No caso das amostras estudadas a observação das duas transições ópticas a 77K foi possível devido à sua alta qualidade em uniformidade e pureza, o que permitiu a sua separação. No caso de baixa temperatura (2K) não é possível observar a emissão dupla por que o nível mais alto não está excitado, enquanto que à temperatura ambiente a energia térmica é muito grande e não permite a resolução das duas transições.

1. F. H. Pollak and M. Cardona, *Phys. Rev.*, 172, 816(1968).

(Apoio FINEP - PADCT/Novos Materiais)

## INVESTIGAÇÃO DA ABSORÇÃO ÓTICA DOS SEMICONDUTORES PbI<sub>2</sub> E HgI<sub>2</sub>

A. Alves, I. Pepe, A. V. B. da Silva, N. B. Oliveira, N. Veissid\*, C. Y. An\* e A. Ferreira da Silva\*

Instituto de Física - UFBa

\* INPE - LAS

*Palavras chave* : PbI<sub>2</sub>, HgI<sub>2</sub>, absorção ótica

Iodeto de chumbo (PbI<sub>2</sub>) e iodeto de mercúrio (HgI<sub>2</sub>) são semicondutores com "gaps" de energia (>2eV) de grande potencialidade para a fabricação de detectores de raios-X e gama, que operam na temperatura ambiente. A baixa corrente de fuga destes materiais favorece que o dispositivo seja mais eficiente do que os outros semicondutores. Estes materiais são de grande interesse para, p. ex., sistemas em satélites, em função das suas elevadas resistências a danos de irradiação. Eles são crescidos pelo processo de sublimação. As atenções estão atualmente mais voltadas para o PbI<sub>2</sub>, por acrescentar uma melhor estabilidade a pressão de vapor como também não sofre transição de fase, em torno de 130 graus Celsius, comparadas com o HgI<sub>2</sub>. Neste trabalho investigamos a absorção ótica na região do gap fundamental, pela técnica de espectroscopia fotoacústica, num espectrômetro totalmente desenvolvido para tal fim. Determinamos o "gap" de energia, E<sub>g</sub>, dos dois materiais por duas técnicas, que chamamos de i) variação da absorção com hv, ii) transição direta. Por exemplo PbI<sub>2</sub> i) < E<sub>g</sub> > = 2,359 +/- 0,021 eV; ii) < E<sub>g</sub> > = 2,301 +/- 0,022 eV enquanto para o HgI<sub>2</sub> : i) < E<sub>g</sub> > = 2,118 +/- 0,018 eV, ii) < E<sub>g</sub> > = 2,058 +/- 0,018 eV. Estes últimos valores são pertos de alguns resultados encontrados na literatura. Para o PbI<sub>2</sub>, falta uma maior investigação nas suas propriedades óticas.

1. A. Ferreira da Silva, N. Veissid, C. Y. An, J. Caetano de Souza, A. V. Batista da Silva, P. C. Farias and M. T. F. da Cruz, *J. Appl. Phys.* 78, 5822 (1995) e referências citadas.

## ANÁLISE ESTRUTURAL DA FASE $\gamma$ NAS LIGAS $\text{Cu}_5\text{Zn}_8$ , $\text{Ag}_5\text{Zn}_8$ , $\text{Cu}_5\text{Cd}_8$ , $\text{Ag}_5\text{Cd}_8$ E $\text{Cu}_{67}\text{Al}_{33}$ FABRICADAS POR MECHANICAL ALLOYING

*Daniela Menegon Trichès e João Cardoso de Lima*  
Departamento de Física - Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-Chave:* mechanical alloying, semicondutores, corrosão

Ligas ricas em zinco e cádmio possuem grande importância tecnológica, seja em revestimentos contra corrosão no caso do Zn, seja em dispositivos ópticos-eletrônicos no caso do Cd. As ligas  $\text{Cu}_5\text{Zn}_8$ ,  $\text{Ag}_5\text{Zn}_8$ ,  $\text{Cu}_5\text{Cd}_8$ ,  $\text{Ag}_5\text{Cd}_8$  e  $\text{Cu}_{67}\text{Al}_{33}$  investigadas por nós, apresentam, para estas composições, estrutura isotípica com a fase  $\gamma$  do latão. A preparação destas ligas por técnicas convencionais apresenta dificuldades devido às grandes diferenças entre os pontos de fusão dos elementos participantes, principalmente nas ligas ricas em Zn (ponto de fusão  $420^\circ\text{C}$ ). Em trabalhos anteriores, mostramos que esta dificuldade é superada usando a técnica Mechanical Alloying (MA). Entretanto, surgem diversas dificuldades na análise estrutural de ligas produzidas por MA: i) o tamanho médio dos cristalitos é da ordem de nanômetros, dificultando a interpretação dos padrões de raios-x medidos; ii) as ligas obtidas possuem defeitos estruturais e tensões na rede cristalina, o que torna necessário um tratamento térmico para promover uma relaxação estrutural (remoção de defeitos e tensões). Os elementos Cu, Zn, Ag, Cd e Al, na forma de pó com alto grau de pureza, foram misturados nas composições nominais já mencionadas. Juntamente com a mistura, foram colocadas esferas de aço e o conjunto foi selado em um cilindro de aço sob uma atmosfera inerte de argônio. Um moinho vibratório (Spex 8000) foi então usado para realizar a moagem mecânica. As técnicas experimentais usadas para caracterizar as ligas obtidas foram Difração de Raios-x e Calorimetria Diferencial de Varredura. Os valores dos parâmetros de rede para fase  $\gamma$  foram refinados através de um procedimento baseado em um ajuste não linear, usando os valores das posições angulares medidos nos difractogramas. Também os padrões de raios-x foram simulados usando o método de Rietveld e os valores dos parâmetros de rede calculados. Comparações dos nossos resultados com aqueles encontrados na literatura mostram uma excelente concordância.

(CNPq/CAPES)

## IMAGEM DE FOTOLUMINESCÊNCIA

*Adamo F. G. do Monte e Júnio M.R. Cruz*

Departamento de Física - Universidade de Brasília  
70910 - 900 Brasília - DF

*Palavras-Chave:* fotoluminescência, imagem, semicondutores

Apresentamos neste trabalho a técnica de Imagem de Fotoluminescência aplicada à determinação do comprimento de difusão em semicondutores. O objetivo desta técnica experimental é obter a largura espacial da região do semicondutor que luminesce quando excitado por um feixe de laser fortemente focalizado. Para tal é necessário ampliar suficientemente a área da região luminescente a fim de medir com precisão a largura da imagem projetada em um anteparo. Após a imagem ser projetada, um detector move-se direcionalmente por toda a sua extensão, medindo a intensidade de luz em cada ponto. Um gráfico da intensidade de luz ao longo de uma reta que passa pelo centro da imagem pode ser interpretado para mostrar como varia o perfil de densidade de portadores fotoexcitados sobre a superfície da amostra. A vantagem principal deste método em relação a outros (SPV - *Surface Photovoltage*; SSPV - *Steady State Photocurrent Voltage*) reside no fato de se eliminar contatos elétricos com a amostra. Os resultados que obtivemos em camadas de InGaAs mostram um comprimento de difusão da ordem de  $300\mu\text{m}$  para este material, consistentes com os dados obtidos por Zemel e Gallant [1] em dispositivos. Esta técnica pode ser utilizada para se estudar processos de transferência de energia ou difusão por fótons em sistemas cristalinos ou amorfos dopados com centros luminescentes. A técnica permite também, com o auxílio de um sistema de *frequency-up-conversion*, realizar medidas resolvidas no tempo, em escalas de pico ou femtosegundo, do diâmetro da região que luminesce.

[1] - Gallant M. and Zemel A. - J. Appl. Phys. 78(2), 1094 (1995).

(CAPES)

## CATHODOLUMINESCENCE AND ELECTRON BEAM INDUCED CURRENT IMAGING OF 980 NM PUMP LASERS.

*Ricardo Benetton Martins*  
Departamento de Rede Externa  
CPQD-TELEBRAS -SP

*keywords:* semiconductor quantum-well lasers, electron-beam characterization techniques, defects imaging.

Optical amplification using Erbium Doped Fiber Amplifiers (EDFAs) have been shown an impressive improvement to the capacity and potential application of optical systems. The signal amplification is achieved by pumping the Erbium doped fiber either by 1480 nanometers (nm) emitting InGaAsP/InP based semiconductor lasers as well as by the 980 nm GaAlAs/GaAs/InGaAs strained lasers. The performance of an EDFA strongly depends on the reliability of the high power pumping laser. In spite of the GaAlAs/GaAs/InGaAs strained layers being a relatively new concept for laser devices, their reliability have been improved very fast in recent years. On the other hand, when these devices degrade, failure analysis is very difficult to be performed due to laser structure complexity, and the identification of the defects that give origin to the degradation is very difficult.

In this work we compared Cathodoluminescence and Electron Beam Induced Current techniques as failure diagnostic tools applied to 980nm high power emitting lasers. It is shown that a combination of both techniques can contribute to a much better understanding of their signal formation in these devices. Investigating the influence of the device layers' structure on the Electron Beam Induced Current and filtered Cathodoluminescence images, the possibilities of each technique for practical applications to 980nm lasers failure analysis are discussed and compared. It will be shown that, due to the presence of a graded gap region close to the single quantum well (SQW), the filtered CL is a more suitable SEM technique to observe defects presents in the active layer compared to the EBIC technique, which can be used as a complementary diagnostic tool.

## Difração Múltipla de Raios-X na Caracterização de Semicondutores Submetidos à Implantação Iônica

*Marcelo Assaoka Hayashi, Sérgio Luiz Morelhão, Lisandro Pavie Cardoso*  
Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP, Campinas, SP  
*José Marcos Sasaki e Luiz Carlos Kretly*  
CCS(LED)-DEMIC, Faculdade de Engenharia Elétrica/UNICAMP, Campinas, SP

**Palavras-Chave:** difração múltipla de raios X, implantação iônica, semicondutores

O potencial da difração múltipla de raios-X (DM) na caracterização de amostras semicondutoras é estendido neste trabalho, com o estudo de amostras de GaAs submetidas à implantação de íons de Se<sup>79</sup>. Basicamente, o fenômeno da difração múltipla ocorre quando, para um único feixe de raios-X incidente, obtêm-se duas ou mais famílias de planos difratando simultaneamente em um monocristal. As novas técnicas baseadas na DM mostram a possibilidade de obtenção de informação tridimensional sobre a rede analisada, e uma grande sensibilidade na detecção de deformações nesta rede, que acarretam mudanças de simetria, através de varreduras Renninger. Contribuições da região implantada e da matriz de GaAs, aparecem numa mesma varredura Renninger, usando a reflexão primária 002 do GaAs matriz, permitindo a análise simultânea de ambas as redes. Utilizando-se o programa baseado na teoria da difração múltipla de raios-X para cristais mosaicos, desenvolvido em nosso Grupo (Morelhão & Cardoso, J. Appl. Phys. (1993), 73(9),4218), que permite o ajuste da posição e perfil dos picos secundários em uma varredura Renninger, obtivemos os parâmetros de rede nas direções paralela e perpendicular à superfície. Além disso, o programa determina as larguras mosaico (perfeição cristalina) para a camada implantada e matriz, no plano da superfície e da interface camada implantada/matriz. Das análises, observamos que a rede da matriz permanece inalterada, enquanto que a região implantada sofre deformação tetragonal, aumentando o parâmetro de rede perpendicular à interface. Os resultados obtidos por esse novo método concordam muito bem (dentro do erro experimental) com os obtidos através de varreduras  $\omega$  (rocking-curves), medidas em reflexões assimétricas 115 e 224, realizadas em um sistema de duplo cristal.

(CNPq)

## MUDANÇAS FOTOINDUZIDAS NA TRANSMISSÃO DA LIGA $\text{AlGaAs}$ PRÓXIMO À TRANSIÇÃO GAP DIRETO-GAP INDIRETO

*L. H.F. Andrade, P.A.M. Rodrigues, C.H. Brito Cruz*

Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física, UNICAMP

*Palavras Chave:* transmissão diferencial,  $\text{AlGaAs}$ , espalhamento intervalas

As mudanças fotoinduzidas na transmissão ( $\Delta T/T$ ) para energias próximas do gap direto em semicondutores altamente fotoexcitados são o resultado de uma complexa superposição de renormalização do band gap (BGR), enchimento dos estados e blindagem da interação Coulombiana dos pares elétron-buraco. Neste trabalho estudamos  $\Delta T/T$  em amostras de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  com concentrações de Al próximo ao crossover  $\Gamma$ -X. Usamos a técnica de excitação e prova para medirmos  $\Delta T/T$  em função do tempo de atraso entre os pulsos de bombeio e de prova. O pulso de bombeio é centrado em 614 nm (2.02 eV) e tem ~150 fs de duração enquanto o pulso de prova é um "contínuo" (580-650 nm) de 30 fs. Quando provamos uma amostra com  $x=0.44$  ( $E_g^\Gamma=1.97$  eV,  $E_g^X=1.99$  eV) em 2.0 eV observamos um bleaching inicial que decai para um valor constante em ~500 fs. Este bleaching é causado principalmente por enchimento de estados e seu decaimento é causado pelo espalhamento de elétrons para os vales laterais. O bleaching residual é devido aos portadores termalizados que permanecem no vale  $\Gamma$ . Provando em 1.94 eV observamos uma oscilação entre absorção induzida e bleaching. Há uma absorção induzida inicial devido ao BGR causado pelos portadores fotoinjectados em  $\Gamma$ . A seguir há um bleaching que decai em ~200 fs e para atrasos de ~600 fs há novamente absorção induzida. A partir daí o bleaching se recupera e permanece constante por, pelo menos, 3 ps. Para uma amostra com  $x=0.48$  ( $E_g^\Gamma=2.02$  eV,  $E_g^X=1.99$  eV) e provando em 2.07 eV observamos um bleaching que decai completamente em ~600 fs. Provando em 2 eV observamos uma absorção induzida inicial seguida de bleaching. Este desaparece em ~300 fs dando lugar a uma nova absorção induzida que depende fortemente da potência de bombeio. A análise quantitativa destas medidas pode ajudar na compreensão da dinâmica de portadores neste semicondutor de muitos vales.

(CNPq, FAPESP, Telebrás)

## ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO COMPOSTO $\text{CaMnO}_x$ USANDO A TÉCNICA DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X MOLES

*M. Abbate e D. Zanchet*

Laboratorio Nacional de Luz Síncrotron, CNPq

*G. Zampieri, J. Briatico, M.T. Causa, M. Tovar e A. Caneiro*

Centro Atomico Bariloche, CNEA

*Palavras-Chave:* Estrutura eletrônica, óxidos de metais de transição, absorção de raios-X moles.

Estudo-se a estrutura eletrônica do óxido  $\text{CaMnO}_x$  ( $2.66 < x < 3.00$ ) usando a técnica de absorção de raios-X moles. O propósito deste estudo é determinar a localização dos buracos eletrônicos em  $\text{CaMnO}_x$  induzidos pelo conteúdo variável de oxigênio. As experiências foram realizadas utilizando a estação experimental do monocromador de grade plana do CAMD. O espectro do nível Mn 2p mostra que o composto de referência  $\text{CaMnO}_{2.66}$  tem uma configuração eletrônica de tipo  $3d^4$ . Os espectros das amostras com maior conteúdo de oxigênio mostram que o número de elétrons Mn 3d diminui. Porém, os espectros do nível O 1s mostram que também tem buracos eletrônicos na banda O 2p. Pelo tanto, a configuração eletrônica no óxido  $\text{CaMnO}_3$  é uma mistura de  $3d^3$  e  $3d^4\bar{L}$ , onde  $\bar{L}$  denota um buraco eletrônico na banda do ligando. Este tipo de comportamento é similar ao observado nos compostos da família  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ , onde a mudança na configuração eletrônica deve-se à substituição de La pelo Sr.

## PROPRIEDADES ÓTICAS DE HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS DE InGaAs/GaAs CRESCIDAS NAS DIREÇÕES [100] E [311]

*H. A. Guerreiro, V. A. Chitta,*  
Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos

*F. E. G. Guimarães, D. Lubyshev, P. Basmaji.*  
Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* InGaAs/GaAs, poços quânticos, direção de crescimento

Uma das principais razões das presentes limitações de dispositivos a base de heteroestruturas semicondutoras reside na própria natureza dos materiais que as constituem. Uma possível solução para esse problema é a utilização de novos materiais, ou ainda o uso dos mesmos, mas crescidos em diferentes direções cristalográficas.

Nesse trabalho, utilizamos a técnica de fotoluminescência (PL), para investigar as propriedades óticas de poços quânticos simples e múltiplos de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  ( $x=0.2$ ) crescidos simultaneamente nas direções [100], [311]A e [311]B. Essas amostras foram crescidas por epitaxia por feixe molecular (MBE) no Instituto de Física de São Carlos-Universidade de São Paulo, IFSC-USP.

Tanto para poços simples como para poços múltiplos, as amostras crescidas na direção [311]A, apresentam melhores propriedades óticas do que as crescidas nas direções [100] e [311]B. Isso se caracteriza por picos de luminescência mais bem definidos e com largura à meia altura cerca de duas vezes menores nas amostras [311]A. Para as amostras [311]B com largura de poço superior a  $50\text{Å}$  o espectro de PL apresenta dois picos, o que é uma indicação de que a espessura crítica para a relaxação do strain foi atingida.

Comparando-se a posição em energia dos picos de PL das amostras [100] com as energias obtidas teoricamente, pode-se concluir que essas amostras apresentam uma alta taxa de segregação de In. Para amostras de poços estreitos ( $L_p < 40\text{Å}$ ) a segregação pode atingir 95% enquanto que para poços mais largos, a segregação é da ordem de 85%. Assim, apesar da excelente qualidade ótica dessas amostras, a segregação ainda é muito importante.

(CAPS)

## FATOR DE FORMA E FUNÇÃO DE INTERFERÊNCIA EM SOLUÇÕES CONCENTRADAS DE SLS, PRÓXIMO À TRANSIÇÃO ISOTRÓPICA - HEXAGONAL

*Rosângela Itri, Ciláine Verônica Teixeira e Lia Queiroz do Amaral*

Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* micelas, lauril sulfato de sódio, espalhamento de raios-X

Soluções micelares concentradas de lauril sulfato de sódio (SLS)/água/decanol vêm sendo estudadas através da técnica de espalhamento de raios-X a baixos ângulos onde uma estreita faixa de uma fase hexagonal ( $H\alpha$ ) foi observada entre as fases isotrópica e nemática, definindo a sequência de transições: isotrópica (I)- $H\alpha$ -nemática cilíndrica ( $N_c$ ) - nemática discótica ( $N_d$ ). As fases foram caracterizadas através do método fotográfico de Laue, enquanto a análise das curvas de espalhamento foi feita através da modelagem do produto do fator de forma micelar pela função de interferência às mesmas. Modelou-se um fator de forma cilíndrico com a finalidade de complementar análise feita previamente com a modelagem de um fator de forma elipsoidal. O fato de termos obtido uma qualidade melhor no ajuste de cilindros com o aumento da concentração nas fases binárias, bem como uma razão  $1 : \sqrt{3}$  entre as posições do primeiro e do segundo picos (evidenciando um empacotamento hexagonal local), enquanto que nas fases ternárias obtivemos melhor qualidade no ajuste de cilindros e uma razão  $1 : 2$  entre as posições dos dois picos quando a concentração de decanol aumenta evidenciam o fato de que o decanol afeta o modo como a transição I- $H\alpha$  ocorre, o que é observado já nas fases isotrópicas, pouco antes da transição. Enquanto no sistema binário há um empacotamento das micelas em uma ordem hexagonal local e a fase  $H\alpha$  apresenta um comportamento típico de objetos duros finitos, no sistema ternário esse empacotamento encontra-se relaxado através de um crescimento micelar e a fase  $H\alpha$  tem um comportamento típico de objetos flexíveis infinitos.

## ESTUDIO DE LA DISPERSION DE LA RELAJACION POR MEDIO DE LA RMN CON CICLAJE RAPIDO DEL CAMPO MAGNETICO EN SISTEMAS MOLECULARES COMPLEJOS

*A. Hidalgo, E. Anordo y D. Pusiol*

Facultad de Matemática Astronomía y Física (Fa.M.A.F)-Universidad Nacional de Córdoba- República Argentina

*Palavra-Chave:* relajación-ciclaje-magnético

Se realizaron estudios de RMN con ciclaje rápido del campo magnético en las fases nemática y sméctica  $C^*$  del 4'-4'-Bis-Heptyloxy-azoxy-benceno. Se intenta dilucidar si el ordenamiento molecular es afectado por los campos magnéticos (el cual define la relajación espín-red y el espectro de la RMN). Los experimentos se llevaron a cabo en un espectrómetro de RMN con ciclaje rápido del campo magnético, básicamente este consiste en dos partes fundamentales: un sistema para pulsar la corriente y mantenerla estable en el electroimán y un equipamiento de RF convencional. Los resultados experimentales indican que la dispersión de los tiempos de relajación espín-red se ve afectada por la presencia de campos magnéticos durante el período de espera (solo a frecuencias bajas). Los estudios de la forma de línea no muestran efectos considerables en la fase sméctica, mientras que en la fase nemática si. Las conclusiones finales, en base a los datos experimentales son que el ordenamiento de largo alcance no se ve afectado en la fase sméctica, solo se afecta el orden de corto alcance. En la fase nemática se afecta el orden de largo alcance.

## DETERMINAÇÃO DO ESPAÇAMENTO DE MOSTRADORES DE CRISTAL LÍQUIDO POR INTERFEROMETRIA

*Marcelo Vantini dos Santos\**, *Marcos H. M. O. Hamanaka\**, *Patrick Verdonck<sup>#</sup>*,  
*Miriam Takayasu*, *Marcos A. Schreiner*, *Luiz A. C. Almeida*, *Alaide Pellegrini Mammara*  
Laboratório de Mostradores de Cristal Líquido/Instituto de Microeletrônica  
Centro Tecnológico para Informática

**Palavras-Chave:** interferometria, medidas de espaçamento, mostradores de cristal líquido

O espaçamento de um mostrador de cristal líquido é um parâmetro importante em sua operação eletro-óptica, influenciando em sua transmitância, tensão de acionamento e tempo de resposta. Neste trabalho estudamos a técnica de interferometria para a medida do espaçamento de células planas de TN-LCDs, comparando-a com a de capacitância e discutindo sua aplicabilidade na fabricação de LCDs no IM/CTI. Determinando-se as distâncias entre máximos (ou mínimos) das franjas produzidas por um laser de He-Ne (632,8nm) incidente a 45 graus, foram medidas células de até 15cm x 15cm de área, em vidro de 1mm com SnO<sub>2</sub> (1000 Å), espaçadas com bastonetes de quartzo de 7,5 µm de diâmetro e seladas nas bordas com epóxi monocomponente. O histograma de 42 medidas efetuadas num mesmo ponto de uma célula tem por valor médio 10.1µm e desvio médio quadrático ±0.3µm. A uniformidade do espaçamento foi avaliada pela medida em 9 pontos ao longo de uma célula, sendo o valor médio (9,6±0,6)µm. Por sua vez, a repetibilidade foi avaliada num lote de 5 células obtendo-se o valor médio de (9,9±0,8)µm. O método vem sendo aplicado na determinação do espaçamento de células até 30µm, o desvio médio quadrático mantendo-se inferior a 7%. O espaçamento, obtido pela medida de capacitância de dispositivos gravados no SnO<sub>2</sub> com áreas de 0.18, 1.1 e 30.25 cm<sup>2</sup>, com um capacímetro HP 4274A, operando a 1000 Hz, tem como valor médio (10.5±0.9)µm. Apesar da técnica de capacitância ser comparável quanto à precisão, a interferometria alia à simplicidade a vantagem de não exigir dispositivos de teste, razão por que vem sendo amplamente empregada na caracterização das células fabricadas na linha piloto do LMI/IM/CTI. Esta técnica é aplicável também na caracterização dos mostradores finais, preenchidos com cristal líquido, devendo-se neste caso considerar a orientação molecular, função da tensão aplicada.

\*Bolsista de IC/CNPq  
<sup>#</sup>LSI/EPUSP

## TÉCNICAS ESTATÍSTICAS PARA IDENTIFICAR DIFERENTES ARMAZENAMENTOS DE ÁGUA SUBTERRÂNEA USANDO ISÓTOPOS E CONDUTIVIDADE ELÉTRICA

*Carla M. Salgado Vidal Silva*, *Marlúcia Freitas Santiago*, *Franquiberto dos Santos Pessoa*,  
*Josué Mendes Filho*, *Horst Frischkorn*, *Júlio César B. Leite*  
Universidade Federal do Ceará

**Palavras-Chave:** análise discriminante, análise de correspondência, isótopos

O objetivo desse trabalho é o uso das técnicas estatísticas, análise discriminante e análise de correspondência, para estudar a separação de grupos de sistemas aquíferos. Essa separação foi feita anteriormente utilizando dados isotópicos, condutividade elétrica e geologia. Estas técnicas estatísticas permitem classificar grupos e os principais fatores responsáveis por essa classificação. Embora uma das principais vantagens do método seja analisar um grande número de variáveis e observações simultâneas, os dados de entrada do nosso problema referentes a cada poço (observações), foram apenas as três variáveis, condutividade elétrica, idade com radiocarbono e oxigênio-18. Neste trabalho estas técnicas foram aplicadas para investigar o comportamento da água armazenada em diferentes zonas aquíferas na bacia sedimentar do Cariri no sul do Ceará. Esta região consiste de um vasto planalto, a Chapada do Araripe, com altitude média de 750 m, tendo no sopé o Vale do Cariri. As Formações que compõem a Chapada e o Vale são distintas sob os aspectos de morfologia, granulometria, permeabilidade e porosidade e são sequências de estruturas aquíferas, semiconfinantes e aquíferas. Os resultados desta análise concordam plenamente com o modelo fenomenológico descrito com base nos mesmos dados para explicar a origem e a dinâmica de circulação das águas infiltradas nesta região. Neste modelo as águas no Vale são misturas de águas oriundas de percolação na Chapada através do aquífero Santana e de infiltração direta na zona de afloramento das Formações no Vale e identificamos a existência de quatro grupos distintos das águas armazenadas nas três Formações aquíferas no Vale. Com estas técnicas foi possível (1) confirmar que os quatro diferentes grupos identificados pelas técnicas isotópicas e medidas de condutividade elétrica são realmente grupos distintos com uma concordância de mais de 80 %, usando a análise discriminante e (2) identificar os graus de mistura dos diferentes grupos, usando a análise de correspondência.

(FUNCAP)

**ESTUDO DE CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS DISPERSOS EM POLÍMERO**  
*Miriam Takayasu, Alaide Pellegrini Mammana, Marcos A. Schreiner, Luiz A. C. Almeida e  
Leandro Ribeiro\**

Laboratório de Mostradores de Cristal Líquido/Instituto de Microeletrônica  
Centro Tecnológico para Informática

*Palavras-Chave:* cristal líquido, cristal líquido disperso em polímero, transmitância óptica

Cristais líquidos dispersos em resina acrílica fotopolimerizada foram estudados quanto a sua transmitância óptica, empregando-se células de vidro de 1mm, recobertas com um filme fino transparente e condutor de SnO<sub>2</sub> para aplicação do campo elétrico. Foram ensaiados os cristais líquidos E7 e K15 da BDH, em diversas concentrações no polímero, determinando-se, em função da tensão aplicada, a intensidade transmitida de um laser de He-Ne em incidência normal à amostra, amostrando-o em 200 Hz para supressão da luz de fundo e detectando-se o sinal com um sensor de silício PIN e um amplificador "lock-in" Stanford Research SR510. Para amostras de E7 na concentração de 50%, na espessura de cerca de 50 µm, a curva de transmitância é pouco inclinada, sua transição iniciando-se em cerca de 40V e seu máximo não sendo atingido até 150V. Aumentando-se a concentração de E7 para 75% não se conseguiu obter filmes contínuos. Por sua vez, para o cristal líquido K15 na concentração de 50% não se observou separação de fase, observada no entanto para a concentração para 80%. Neste caso, amostras com cerca de 10 µm de espessura, apresentaram tensão de limiar e de saturação respectivamente de 5 e 20 V, enquanto que para a concentração de 86% esses valores diminuíram para 2 e 7 V. Maiores concentrações de cristal líquido K15 não puderam ser ensaiadas por não formarem filmes contínuos. São ainda apresentadas as curvas de transmitância em função da tensão para três comprimentos de onda (480, 530, e 633nm), obtidos com um monocromador Unicrom da Funbec e também micrografias das estruturas de fase nas diversas concentrações estudadas.

\*Bolsista de IC/CNPq

**MODELO DE SPINS PARA O ESTUDO DE FASES NEMÁTICAS DE UM  
CRISTAL LÍQUIDO MICELAR: EFEITO DA POLIDISPERSIVIDADE**

*Eduardo Fontes Henriques e Vera Bohomoletz Henriques*  
IFUSP

*Palavras-Chave:* cristais líquidos, fases biaxiais, teoria de Maier e Saupe.

Estudamos, em continuação a um trabalho anterior (XVII ENFMC, Livro de resumos, pg125), o diagrama de fases, em campo médio, de um modelo de spin 1 representando uma solução de micelas uniaxiais interagindo por um potencial de Maier e Saupe com direções discretizadas e sobre uma rede. Os objetos (micelas), embora sempre uniaxiais, são considerados, na solução, como tendo tamanhos variáveis e esse efeito (polidispersividade) é encarado como determinante de uma desordem em sítio governada por uma distribuição de constantes de acoplamento independente da temperatura. Fases biaxiais estáveis são obtidas no modelo em duas versões para a distribuição de constantes de acoplamento: a de uma distribuição delta bimodal (representando dois tamanhos de objetos) e a de uma distribuição gaussiana de tamanhos (representando a presença, na solução, de micelas de todos os tamanhos possíveis em torno de um central). O diagrama de fases completo prevê a presença, nos dois casos acima descritos, de duas fases uniaxiais. Essas fases uniaxiais representam ordenamento nemático com predominância ou de objetos na forma de cilindros alongados ou de objetos na forma de discos e estão separadas, para baixas temperaturas, por uma fase biaxial. Nesta fase biaxial temos a presença dos dois tipos de objetos no caso da distribuição bimodal e uma pequena predominância de algum tipo (disco ou cilindro) no caso da distribuição gaussiana. Nestes dois casos, a fase biaxial está separada das uniaxiais por linhas críticas, sendo que o diagrama completo inclui linhas de coexistência entre as fases nemáticas e a isotrópica e um ponto de Landau, onde terminam as linhas de coexistência e as linhas críticas.

## TRANSIÇÕES DE FASES INDUZIDAS POR POLÍMEROS EM CRISTAIS LÍQUIDOS LIOTRÓPICOS

*Leila Thomazelli Thieghi, Suhaila Maluf Shibli e Antônio Martins Figueiredo Neto*  
Grupo de Óptica de Cristais Líquidos do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** transição de fase, cristal líquido, polímero

Um aspecto interessante da transição nemática uniaxial-biaxial em liotrópicos não estudado é o seu comportamento crítico, adicionando-se um polímero na sua composição. A determinação deste comportamento é feita investigando-se os expoentes críticos da transição. Estes expoentes são um conjunto de índices que descrevem o comportamento crítico de várias quantidades perto do ponto crítico, e são obtidos através de medidas de birrefringência óptica. A técnica experimental utilizada é a de microscopia óptica de luz polarizada. Este trabalho é a continuação de um estudo da adição do polímero poli-etileno-glicol (PEG) em nemáticos liotrópicos. Neste projeto, adicionamos quantidades crescentes dos polímeros álcool poli-vinílico (PVA) e óxido de poli-etileno (PEO) a um cristal líquido liotrópico na fase nemática-calamítica e observamos a evolução da seqüência de fases em função da temperatura. Analisamos a topologia do diagrama de fases em função da concentração molar de PVA e PEO e comparamos os resultados com os já estabelecidos para a dopagem com PEG. Iniciamos realizando uma procura da relação entre a composição relativa dos constituintes do cristal líquido (laurato de potássio, 1-decanol e água) e o valor do expoente crítico. Desta avaliação, determinamos que mantendo-se a concentração do decanol fixa temos, para o expoente crítico, valores de 0,5 para pequena concentração de água e valores de 0,38 para concentrações maiores. Ao longo deste trabalho, concluímos que os polímeros induzem transições de fases em cristais líquidos liotrópicos e também alteram os modelos estatísticos que regem estas transições, dependendo da concentração inicial do cristal líquido, da estrutura molecular e da concentração do polímero na amostra cristalina.

(CNPq)

## TURBULENCE SPLIT OF POLYMER IN A FLUID FLOW

Dias C. L., Oliveira F.A. and Longa L.  
Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

**Keywords:** polymer split, turbulence, fluid flow

The degradation of polymer in a turbulent fluid flow has intensively been investigated since last decade [1]. The addition of long molecules to liquid flow has several practical applications. However, limits are set on the usefulness and range of applications of polymers additives because the longest polymers chains are more effective, but are also most likely to break during the flow. The mechanism of breaking is quite peculiar and results are quite different from those where the center of mass of a chain is at the lab frame, while its monomers are free to move [2]. We present here the results of computer simulations. The main results are: first, in the turbulence regime the chains break mainly at the middle point. This is an unusual result compared to the equal breaking probability in the absence of flux[2]; second, the average breaking time is not inversely proportional to the chain length but rather exhibit a most fast decay, which in some cases is a power law. Finally, we compare those results with experiments. Next we will try to generalize the present theory for simple chains[2] to explain the results.

### References

- [1] A. F. Horn and E. W. Merrill, *Nature* 312 140 (1984). J.A. Odel and A. Keller, *Nature* 312 98 (1984) - J. Polymer (communication) 24, 7 (1983).
- [2] F. A. Oliveira to be published.

## EVIDENCE FOR MULTIPOLAR CHARGE DISTRIBUTION IN FALLING WATER DROPS

José A. Fornés

*Instituto de Matemática e Física, UFG, Caixa Postal 131, 74001-970, Goiânia, GO, Brazil.*

Joaquim Procopio

*Instituto de Ciências Biomédicas, USP, Caixa Postal 66208, 05508-970, São Paulo, SP, Brazil.*

José Carlos Sartorelli

*Instituto de Física, USP, Caixa Postal 20516, 01498-970, São Paulo, SP, Brazil.*

A method for producing water drops with very small net charge (few fC) was employed in conjunction with a sensing device, in order to identify the electric signals produced by falling water drops. The sensing device consists of a wire loop hooked to a patch-clamp amplifier set into voltage-clamp mode. Water drops with very small net charge, produce a negligible signal at the sensing device but when falling through a horizontal charged capacitor they produce well defined and reproducible signals which are proportional to the capacitor voltage.

Such signals can be simulated by a multipolarly charged object with punctual dimension traveling through the sensor with the same velocity as the drop. The charges in the simulating object are distributed according to a superposition of a dipole, and a quadrupole. The dipole and quadrupole have components in the vertical and horizontal directions.

The contribution of the induced and permanent water dipole moments has been estimated: the permanent water dipole summated over the drop volume and corrected by the Langevin equation has a value of  $48 \times 10^{-4}$  e.s.u. what is about 30 times larger than the dipolar vertical component  $p_z$  of the simulated drop signal. This result could be explained by considering the water drop dipoles as being shielded from the external field by a surface layer of highly mobile electrons.

## ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DE CONDIÇÕES DE PREPARAÇÃO NA ADSORÇÃO DE FILMES AUTOMONTADOS.

R.S. Pontes, M. Raposo\* e O.N. Oliveira Jr.

Instituto de Física de São Carlos, USP

Filmes automontados (*self-assembled*) (SA) são produzidos pela adsorção espontânea de policátions e poliânions sobre um substrato sólido, imergindo o substrato alternadamente em soluções desses materiais. A quantidade de material adsorvido, bem como a cinética de adsorção, depende das condições experimentais de preparação. Os fatores mais importantes são o pH e a concentração das soluções poliméricas, o material do substrato sólido e o tratamento prévio que sofre. Além desses fatores, já mencionados na literatura, descobrimos recentemente que o processo de secagem, principalmente durante o crescimento de uma dada camada, também pode influenciar as propriedades do filme automontado. Neste trabalho, serão empregados filmes SA de ácido polivinil sulfônico (PVS) como poliânion e poli(o-metoxianilina) (POMA) como policátion, depositados sobre substratos de vidros submetidos a dois processos de hidrofilição. A cinética de adsorção é monitorada por espectroscopia UV-vis. A adsorção de uma camada se dá, em geral, em duas etapas: i) um processo rápido típico de cinética de primeira ordem (exponencial), com tempo característico de ca. 5s, ii) um processo bem mais lento com tempo característico da ordem de 100s, com dependência temporal que varia com as condições de preparação. Será mostrado também que quando o filme é seco em intervalos regulares (5s) durante o crescimento de uma camada, a quantidade de material adsorvido aumenta consideravelmente.

Apoio: FAPESP, FINEP, JNICT (Portugal)

\*Faculdade de Ciência e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Portugal

## CHAVES LÓGICAS DE POLIACETILENO

*Anderson Clayton A. Nascimento, Geraldo Magela e Silva*

Departamento de Física, Universidade de Brasília

70.910 -900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave:* chaves lógicas, poliacetileno, *ab initio*

A álgebra de chaveamento lógico é a alma de toda a moderna eletrônica digital. Desde o seu nascimento têm-se implementado estas chaves de diversas maneiras. Estamos chegando hoje ao limite de miniaturização dos dispositivos eletrônicos feitos a partir do silício, novas pesquisas vêm sendo feitas para obter-se novos materiais que possibilitem algum avanço nos dispositivos eletrônicos. A descoberta dos polímeros condutores sintéticos representou a possibilidade de conseguir-se chaves lógicas moleculares. Em nossa pesquisa desenvolvemos um trabalho onde aspectos do cálculo da estrutura eletrônica de chaves lógicas moleculares é realizado. Em uma cadeia de trans-poliacetileno modificada, a mudança de simples e duplas ligações acompanhada da passagem de um sólton é controlada através da excitação provocada por um fóton. Isto se dá através da ligação de dois radicais à cadeia polimérica, estes dois radicais têm, cada um, a propriedade de ser doador e receptor de elétrons. É sabido que as deformações de ligação, tanto no estado fundamental, quanto no excitado, são determinadas, essencialmente, pelo mais alto orbital molecular ocupado e pelo mais baixo orbital molecular desocupado. Estes foram calculados através do método Hartree-Fock com orbitais de Slater expandidos em três gaussianas. Foram calculados o momento de dipolo, análise populacional e a estrutura da molécula. Os cálculos foram feitos utilizando o programa GAMESS.

(CNPq)

## Retificador molecular revisitado

M.A. Pickholz e M.C. dos Santos

Instituto de Física, UNICAMP, 13081-970 Campinas SP, Brazil

**Palavras-chave:** moléculas push-pull, CI semiempírico, estrutura eletrônica

Moléculas conjugadas e polímeros tem sido amplamente estudados pelas aplicações na fabricação de dispositivos eletrônicos. Um exemplo de estes dispositivos, um retificador molecular, tem sido reportado recentemente na literatura [1]. O retificador é construído mediante deposição de multicamadas de Langmuir-Blodgett de uma molécula anfifílica, (1-hexadecyl-4-quinolinium)- $\alpha$ -cyano-4-styryldicyanomethanide, ou alquil-Q3CNQ entre dois eletrodos de Mg e Ag. A parte ativa destas moléculas consiste num sistema conjugado tipo doador-ponte conjugada-aceitador. As propriedades retificadoras tem sido interpretadas em termos de molécula *zwitteriônica* (de carga separada), já que esta é a conformação em estado sólido.

Neste trabalho nós estudamos a estrutura eletrônica e conformacional da molécula CH<sub>3</sub>-Q3CNQ a partir de cálculos ZINDO/CI e AM1/CI.

Foram feitos cálculos de otimização da geometria em presença de campo elétrico estático orientado ao longo do eixo longo da molécula, usando a aproximação de campo finito. Observa-se um comportamento claramente não linear e assimétrico com respeito a orientação do campo elétrico. A baixas intensidades de campo a molécula é neutra enquanto que para altas intensidades de campo (negativo) a molécula é *zwitteriônica*.

[1] A.S.Martin,, J.R.Sambles and G.J.Ashwell, Phys.Rev.Lett. 70 ,218-221(1993)

( CNPQ, FAPESP e FINEP)

## POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE FILMES DE LANGMUIR E LB DE COMPOSTOS ALIFÁTICOS SIMPLES

Cláudia Bonardi e Osvaldo Novais de Oliveira Junior

Instituto de Física de São Carlos - USP

**Palavras-chave:** potencial de superfície, filmes de Langmuir, filmes LB

Resultados antigos de potencial de superfície de filmes de Langmuir não eram reproduzíveis, devido à presença de impurezas na subfase aquosa sobre a qual os filmes se formavam. Dados recentes para o ácido esteárico, no entanto, mostram um comportamento reproduzível. Promoveu-se, com sucesso, a recaracterização de compostos alifáticos simples através de medidas de potencial ( $\Delta V$ ) e pressão de superfície ( $\Pi$ ) dos filmes obtidos sobre subfases devidamente puras. Os resultados obtidos mostram que o potencial de superfície desses filmes é nulo para grandes valores de área molecular média ( $A$ ), aumentando a partir de um valor de área crítica ( $A_{cr}$ ), até atingir um valor máximo ( $\Delta V_{máx}$ ). As características das monocamadas foram analisadas, também, em função do pH da subfase. As curvas de pressão e potencial de superfície para álcoois e ésteres apresentam poucas alterações com a variação do pH, diferentemente do comportamento apresentado por ácidos e amina, onde a contribuição da dupla camada elétrica, especialmente para o potencial de superfície, é significativa. Os modelos para o potencial de superfície de filmes de Langmuir mostram boa concordância com os resultados obtidos. Produziu-se filmes Langmuir-Blodgett (LB) a partir de monocamadas de ácido esteárico os quais foram posteriormente caracterizados por medidas de potencial de superfície. Essas medidas tiveram por objetivo comprovar a importância da contribuição dipolar para o potencial desses filmes depositados. Os resultados indicam que além da contribuição dipolar há uma contribuição negativa da interface substrato/filme.

(FAPESP/ CNPq)

## PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES AUTO-MONTADOS DE POLÍMEROS CONDUTORES

*Clécio G. dos Santos e Celso P. De Melo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-chave:* auto-montagem, FTIR, polímeros condutores

Nos últimos anos, a técnica de auto-montagem tem sido proposta como um modo simples e eficiente de obtenção de amostras poliméricas com alto grau de ordem estrutural. Neste trabalho apresentamos detalhes da preparação de heteroestruturas conjugadas formadas pela deposição de múltiplas camadas moleculares de polímeros como o poli-3-ácido tiofenacético (P3ATA), a polianilina (PAN) e o polipirrol (PPY). Este processo se baseia na adsorção eletrostática de polímeros condutores com cargas alternadamente oposta, o que permite a deposição por auto-montagem de bicamadas do tipo P3ATA/PAN, PAN/PPY e P3ATA/PPY sobre substratos sólidos a partir de soluções diluídas dos respectivos poliânions e policátions. Os filmes foram obtidos sobre lâminas de vidro condutor, quartzo e vidro, ou sobre cristais de AgBr e ZnSe, de modo a que pudessem ser analisados por meio de espectroscopia UV-visível e na região do infravermelho. O monitoramento da uniformidade das amostras foi realizado examinando o caráter linear das intensidades de diversas bandas de absorção no visível com o crescimento do número de bicamadas depositadas. Por sua vez, pela comparação das razões dicróicas dos picos de absorção para radiação  $p$ - e  $s$ -polarizadas usando reflexão total atenuada na região do infravermelho foi possível examinar o grau de ordenamento e a orientação relativa das cadeias poliméricas.

(Apoio CNPq, FINEP e FACEPE).

## PROCESSOS NÃO-LINEARES EM DERIVADOS DE RETINAL

*Arandi G. Bezerra Junior\*, Anderson S. L. Gomes, Cid B. de Araújo, Celso P. de Melo*  
Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco

\*Departamento de Física - Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná

*Palavras-Chave:* materiais orgânicos, retinal, z-scan

Materiais orgânicos apresentam grande potencial para serem usados como dispositivos fotônicos. A versatilidade de síntese química permite otimizar sua estrutura molecular para maximizar sua resposta não-linear. As estruturas poliméricas conjugadas, devido a seus elétrons  $\pi$  deslocalizados, possuem as maiores não-linearidades ópticas não ressonantes o que tende a reduzir os efeitos térmicos, facilitando a construção de dispositivos. Outra característica importante dos materiais orgânicos são os tempos de resposta não-linear curtos. Neste trabalho, utilizamos o segundo harmônico (532 nm) de um laser Nd:YAG Q-Switched e Mode Locked, operando a uma taxa de repetição de 5 Hz e a técnica de Z-scan para medir não-linearidades ópticas de terceira ordem ( $\chi^{(3)}$ ) em derivados do retinal. O retinal, aldeído da vitamina A, é o cromóforo dos pigmentos visuais (rodopsina) e dos pigmentos de membranas púrpuras (bacterorodopsina), que desempenham papel fundamental na transdução da energia luminosa. Preparamos amostras de 13 cis ácido retinóico, 13 cis retinal aldeído e all trans ácido retinóico com concentrações da ordem de  $10^{-2}$  mol/l, dissolvidas em clorofórmio. Observamos que o índice de refração não-linear do retinal é negativo (o material é defocalizador) e medimos o valor de  $\chi^{(3)}$  que é da ordem de  $10^{-12}$  esu. Calculamos também as hiperpolarizabilidades ( $\gamma$ ) associadas e obtivemos  $\gamma \sim 10^{-33}$  esu. Observamos também que a amostra de 13 cis retinal aldeído, após sofrer processo de isomerização (para all trans) teve sua não-linearidade aumentada em uma ordem de grandeza. Comparamos estes resultados com os obtidos por outras técnicas como geração de terceiro harmônico e mistura degenerada de quatro ondas.

## SIMULAÇÃO DE REDES DE SÓLITONS EM POLIACETILENO

*Cleber da Silva Pinheiro, Geraldo Magela e Silva*  
Departamento de Física, Universidade de Brasília  
70.910-900 - Brasília - DF

*palavras-chave:* redes de sólitons, dinâmica de colisões, poliacetileno

A dinâmica de colisões em redes de defeitos estruturais em poliacetileno é numericamente estudada usando uma extensão do modelo de Su, Schrieffer e Heeger (SSH) para incluir a influência de um campo elétrico externo. O Campo elétrico é usado para acelerar sólitons eletricamente carregados na molécula e é introduzido em termos de um potencial vetor dependente do tempo. Desde que consideramos o campo elétrico aplicado uniforme, o vetor potencial é independente das coordenadas espaciais. A simulação numérica é feita através da discretização do tempo, resolvendo-se as equações de movimento acopladas de fônons e das funções de onda dos elétrons  $\pi$ . Tais equações são numericamente integradas sobre o tempo real. Neste trabalho estuda-se as interações entre quatro sólitons numa mesma molécula. Colisões entre sólitons com diferentes cargas são consideradas. São aplicados campos elétricos com várias intensidades que transmitem velocidades distintas ao defeito carregado na rede de sólitons. A probabilidade de transferência de carga entre os defeitos estruturais após as colisões é analisada. É encontrado que, embora sólitons isolados numa cadeia podem trocar seus momentos em uma colisão, vários sólitons funcionam como uma barreira atenuando a transferência de momento. É observada uma oscilação de carga após a colisão. Nota-se que defeitos neutros em uma rede de sólitons são instáveis. São observadas também trocas entre a energia eletrônica e a energia cinética da rede.

(CNPq)

## Investigação teórica de um fio molecular

*A. M. Saleh e M. C. dos Santos*  
Instituto de Física, Unicamp, 13081-970, Campinas, SP

*Palavras-Chave:* moléculas *push-pull*, CI semi-empírico, estrutura eletrônica

Materiais moleculares como dispositivos, principalmente nas últimas décadas, têm se mostrado úteis devido às suas propriedades eletrônicas e opto-eletrônicas. Na década de 70 a descoberta de polímeros de condutividade intrínseca deu motivação para que esses tipos de materiais fossem usados em eletrônica. Compostos tendo a estrutura de poliaceno tem sido sintetizados. Oligômeros de poliacenoquinonas tem sido chamados de " fios molecular " devido à rigidez da estrutura e a possibilidade de produzir moléculas com um comprimento bem definido. Outras propriedades que também têm sido encontradas são a formação de filmes de Langmuir-Blodgett orientados e a auto-organização destas moléculas em uma superfície metálica. Neste trabalho nós apresentamos as estruturas de conformação e estrutura eletrônica de uma oligoacenoquinona e um derivado *push-pull* por meio de cálculos semi-empíricos AM1 e ZINDO/CI. Uma simulação de interação destes sistemas com uma superfície de ouro ( 100 ) é também realizada, utilizando para isso, os métodos de mecânica molecular ( para obter uma conformação mais estável ), e o método de Hückel estendido ( para interação eletrônica ). Discutimos a adequação desses sistemas para uso em eletrônica.

( CAPES, CNPQ, FAPESP e FINEP )

## ANÁLISE CONFORMACIONAL DE CARBOHIDRATOS: A AMILOSE E CELULOSE REVISITADOS

*Alexandre Teso e José Roberto Ruggiero*  
Departamento de Física - IBILCE - UNESP - São José do Rio Preto.

**Palavras-Chave:** *análise conformacional, amilose, celulose*

A teoria estatística de isômeros rotacionais tem tido inúmeras aplicações no estudo e interpretação de propriedades de polímeros em termos do esqueleto da cadeia. A liberdade conformacional da cadeia restringe-se às rotações em torno à ligação glicosídica quando ela é aplicada aos carboidratos.

Para a Amilose e seus derivados (C6 - oxidada e carboximetilamilose - CMA) e celulose a variação da razão característica com a temperatura, assim como, o coeficiente de temperatura foram determinados a partir de medidas viscosimétricas e de espalhamento de luz, constituindo um bom referencial para o confronto de modelos teóricos.

Neste trabalho apresentamos alguns resultados relativos ao cálculo destas propriedades, entre outras, em função do campo de força e das rotações dos grupos exocíclicos, ligados ao carbono C6, ao redor da ligação C5-C6. Discute-se, ainda, a influência da continuidade da cadeia, interação de vizinhos não imediatos, nestas propriedades usando-se o método Monte Carlo para a geração de cadeias.

(CNPq)

## ANÁLISE CONFORMACIONAL DO ÁCIDO POLIGALACTURÔNICO: EFEITOS DAS INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE EM OLIGOMEROS

*José Roberto Ruggiero, Ranieri Urbani e Attilio Cesàro*  
Departamento de Física, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto-SP; Departamento de Biofísica, Biochimica e Chimica delle Macromolecole - BCM, Università di Trieste, Itália

**Palavras-Chave:** *análise conformacional, PGA, estatística de polímeros*

Usando o método Monte Carlo e a análise estatística baseada na isomeria rotacional estudamos o comportamento de equilíbrio (razão característica, distância entre extremos, comprimento de persistência, etc...) do ácido poligalacturônico, PGA, em solução, em função da distribuição de cargas (grau de ionização,  $\alpha$ ). Consideramos explicitamente efeitos de curto (alterações locais na geometria dos monômeros devido a deprotonação) e longo alcance. Estes, tratados na aproximação de campo médio, restringem-se à interação de pares tipo coulombiano, acrescido da blindagem devido a presença de sal suporte na solução. A dependência destas grandezas com a distribuição de população entre os vários estados de ionização será também discutida. Mostramos que a distância entre extremos não apresenta um crescimento monótono com o grau de ionização, passando por um mínimo para  $\alpha$  ao redor de 0,25, devido aos efeitos de curto alcance. Para  $\alpha > 0,5$  obtém-se o comportamento esperado.

## FILMES AUTOMONTADOS DE LISOZIMA

C.E. Borato, P.S.P. Herrmann, L.A. Colnago, L.H.C. Mattoso e O.N. Oliveira Jr.\*  
CNPq-EMBRAPA, São Carlos, SP

*Palavras-chave: lisozima, filmes ultrafinos, automontagem*

A técnica de automontagem (*self-assembly*) (SA) foi utilizada para a fixação da proteína lisozima sobre substratos de quartzo hidrofílicos. A adsorção se dá por interação eletrostática uma vez que a lisozima, nos pHs empregados de 4 a 8 é um polícatión. A cinética de adsorção (ou fixação) foi analisada por espectroscopia UV, e parece obedecer um mecanismo de cinética de primeira ordem. O tempo característico, entretanto, depende das condições de preparação do filme. Por exemplo, quando o filme é secado continuamente a adsorção é bastante lenta, com uma camada só se completando após uma hora de imersão do substrato para uma concentração de  $10^{-4}$  M de lisozima pura, pH = ~ 6. Na presença de grandes quantidades de sal, ou sem a secagem do filme, uma camada se completa em menos de 10 minutos. Entretanto, a quantidade de material adsorvido é consideravelmente menor. O efeito do pH da solução também foi investigado. Como era de se esperar, a adsorção é mais eficiente para pHs menores, pois a lisozima tem sua carga aumentada. Multicamadas automontadas foram depositadas, alternando-se lisozima com poli(estireno) sulfonado, que atua como poliânion. A absorvância no UV do filme cresce linearmente com o número de camadas depositadas, indicando que cada camada de lisozima contribui com a mesma quantidade de material. A técnica SA parece extremamente promissora para se conseguir o crescimento epitaxial em 3D de proteínas, o que pode auxiliar sobremaneira na determinação da estrutura de proteínas e outras macromoléculas biológicas por difração de Raios-X.

\*Instituto de Física de São Carlos, USP

Apoio: FAPESP, Finep, CNPq

## INVESTIGAÇÃO DA ORDEM ESTRUTURAL DE FILMES MISTOS DE LANGMUIR-BLODGETT DE POLI-3-HEXADECILTIOFENO/ÁCIDO BEHÊNICO

Clécio G. dos Santos<sup>a</sup>, Celso P. De Melo<sup>a</sup> e Rosa S. Maior<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

<sup>b</sup>Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-chave: FTIR, LB, politiofenos*

Neste trabalho apresentamos resultados de uma investigação espectroscópica na região do infravermelho sobre a ordem estrutural de filmes mistos de poli-3-hexadeciltiofeno (P3HDT) com de ácido behênico (AB) preparados pela técnica de Langmuir-Blodgett. Inicialmente, o P3HDT foi preparado por oxidação química usando-se  $\text{FeCl}_3$  como agente oxidante. Embora não tenha sido possível obter monocamadas estáveis do polímero puro em uma interface ar-água (provavelmente devido ao insuficiente caráter anfífilico da molécula), filmes de Langmuir da mistura AB/P3HDT nas proporções de massa 7:1, 5:1, 3:1 e 1:1 puderam ser bem caracterizados na interface e foram a seguir transferidos para lâminas de quartzo e de vidro condutor, e para cristais de AgBr e ZnSe, sempre com razões de transferência da ordem de  $1,0 \pm 0,1$ . A investigação da orientação molecular média foi efetuada com o auxílio de um espectrômetro para a região do infravermelho por Transformada de Fourier equipado com um detector MCT, pela comparação das intensidades relativas das frequências de vibração das ligações típicas da cadeia alquílica, presente nos dois componentes do filme misto. Como as regras de seleção obedecidas em um experimento de reflexão-absorção com incidência em ângulo rasante são distintas daquelas observadas na reflexão total atenuada, a variação do grau de ordem estrutural das diferentes amostras pode ser acompanhada como função da concentração relativa do polímero na mistura.

(Apoio CNPq, FINEP, FACEPE).

## CINÉTICA DE ADSORÇÃO DE FILMES AUTOMONTADOS DE POLI(O-METOXIANILINA).

M. Raposo<sup>\*</sup>, R.S. Pontes, L.H.C. Mattoso e O.N. Oliveira Jr.

Instituto de Física de São Carlos, USP

A técnica de automontagem (*self-assembly*) (SA) foi adaptada recentemente para a fabricação de filmes ultrafinos organizados de materiais poliméricos. O grande interesse na técnica está na possibilidade de controle em nível molecular dos filmes poliméricos, apesar da simplicidade do método. Na técnica SA, camadas de policações e poliânions são depositadas alternadamente sobre um substrato sólido através da imersão deste em soluções poliméricas. Como o uso da técnica para polímeros condutores é recente e muitos laboratórios estão empenhados na produção de dispositivos, muitos aspectos essenciais do processo de formação dos filmes estão por ser esclarecidos. Nosso interesse em particular é o mecanismo de adsorção das cadeias poliméricas sobre o substrato, e para isso estamos empregando filmes automontados de poli(o-metoxianilina) (POMA) dopada alternada com ácido polivinil sulfônico (PVS), depositados sobre vários tipos de substrato. A cinética da adsorção é acompanhada por espectroscopia UV-vis uma vez que a POMA dopada apresenta um pico polarônico em cerca de 750nm. Este pico se desloca durante a adsorção de uma mesma camada, o que indica um comportamento dinâmico de dopagem e desdopagem da POMA na sua interação com o substrato. Duas etapas podem ser identificadas na adsorção de uma camada de POMA: a primeira é típica de cinética de primeira ordem, com um tempo característico de apenas 5s, e parece independe do tipo de substrato empregado e das condições de preparação. A outra etapa, bem mais lenta com tempo característico da ordem de 100s, pode ser descrita como sendo de primeira ordem apenas em alguns casos. Por exemplo, nas curvas de absorvância versus tempo para POMA adsorvida sobre vidro hidrofiliizado há uma inflexão após a primeira etapa que só pode ser explicada com dependências exponenciais com argumentos  $t^n$ , com n variando de 1.5 a 2.

Apoio: FAPESP, FINEP, JNICT (Portugal)

<sup>\*</sup>Faculdade de Ciência e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Portugal

## ESTUDO DAS MUDANÇAS NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO COMPOSTO $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Ni}_y\text{O}_{4+\delta}$ POR FOTOABSORÇÃO DE RAIOS-X MOLES (SXAS)

P. N. Lisboa Filho<sup>a</sup>, M. Abbate<sup>b</sup>, A. Mocellin<sup>b</sup>, E. Morikawa<sup>c</sup>, F. A. Araujo-Moreira<sup>d</sup>  
W. A. Ortiz<sup>a</sup>, E. R. Leite<sup>d</sup> e E. Longo<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Grupo de Supercondutividade e Magnetismo, Departamento de Física

<sup>d</sup> Laboratório Interdisciplinar de Eletroquímica e Cerâmica, Departamento de Química  
Universidade Federal de São Carlos

<sup>b</sup> Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS/CNPq

<sup>c</sup> Center for Advanced Microstructures and Materials - Louisiana State University

*palavras-chave: estrutura eletrônica, supercondutores, substituições*

O composto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  é um isolante antiferromagnético. Na década de 80, compostos cerâmicos preparados a partir deste precursor, como por exemplo o  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , deram origem aos chamados supercondutores de alta temperatura crítica (HTSC). Neste trabalho, estudamos um composto da mesma família, o  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Ni}_y\text{O}_{4+\delta}$ , em que átomos de Cu dos planos de cobre-oxigênio são substituídos por Ni. A temperatura crítica depende das concentrações relativas, sendo máxima para  $x = 0.15$  e  $y = 0.03$ . O principal objetivo deste trabalho é conhecer a influência do Ni na estrutura eletrônica e nas propriedades supercondutoras do sistema. Para este estudo, foi utilizada a técnica de fotoabsorção de raios-X moles, com medidas realizadas no Center for Advanced Microstructures and Materials (CAMD/LSU), utilizando-se um monocromador de grade plana (PGM-CAMD), com resolução de energia na faixa de 0.5eV a 525eV. Os experimentos foram conduzidos à temperatura de 300K, na qual todas as amostras encontram-se no estado normal. Foram realizadas medidas em seis amostras, com as seguintes composições relativas (x,y): (0, 0), (0, 0.03), (0, 0.10), (0.15, 0), (0.15, 0.03) e (0.15, 0.10). Os resultados mostram que as bandas 3d do Cu e do Ni perto da borda estão fortemente misturadas. Os espectros para  $y \leq 0.03$  não apresentam mudanças com respeito aos compostos de referência (0,0). Porém, os espectros das amostras com valores de y maiores mostram a abertura de um gap eletrônico. Este gap reflete o caráter semicondutor destas amostras e é devido aos efeitos de correlação nas bandas 3d dos metais de transição.

## PREPARAÇÃO E PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ MONOCRISTALINO COM BAIXA CONCENTRAÇÃO DE OXIGÊNIO

Job Paim da Silva Filho e Jacob Schaf  
Instituto de Física-UFRGS

*Palavras-chave: monocristais, propriedades magnéticas, supercondutividade*

Realizamos um estudo experimental em monocristais de  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  com concentrações de oxigênio muito baixas, envolvendo método de preparação de amostras grandes (de até 5 mm) e de boa qualidade, estudo estrutural por meio da difratometria de raios-X, oxigenação dos monocristais por etapas e determinação de suas propriedades magnéticas para diversas concentrações de oxigênio. As propriedades magnéticas estudadas foram determinadas por medidas de susceptibilidade magnética DC, nas condições de amostra resfriada em campo nulo ZFC e em campo FCC, usando um magnetômetro de amostra vibrante (foner), para diversos campos estáticos aplicados. Especificamente medimos a irreversibilidade magnética, mobilidade do fluxo magnético e efeito Meissner para campo aplicado paralelo e perpendicular ao eixo c. Os resultados de difratometria de raios-X sobre os planos de CuO mostram a estrutura ortorrômbica monofásica. A temperatura crítica ( $T_c$ ) e a linha de irreversibilidade magnética  $T_{ir}(H)$  se deslocam para temperaturas mais altas a medida que cresce a concentração de oxigênio. Os resultados da irreversibilidade magnética são diferentes, porém, compatíveis com aqueles observados em amostras monocristalinas e policristalinas saturadas de oxigênio.

Apoio financeiro: CNPq.

## A INFLUÊNCIA DE DEFEITOS MECÂNICOS NA ABSORÇÃO DE RF EM FILMES-FINOS SUPERCONDUTORES

*George Cajaty B. Braga, Flávio A. Campos e Aderbal Carlos de Oliveira*  
Departamento de Física, Universidade de Brasília,  
70.910-900 Brasília - DF - Brazil

*Palavras-Chave:* Supercondutor filme-fino, Absorção RF em filmes finos supercondutores

O Estudo da Susceptibilidade Magnética e Absorção de Rádio Frequência devido à sensibilidade e simplicidade da teoria, tem sido de grande interesse para caracterização de supercondutores a alta temperatura. Neste trabalho estudamos amostras de filmes finos YBCO depositadas em substrato de LaO e Mg, com o intuito de entender melhor o fenômeno da absorção de RF tendo em vista aplicações na construção de um sensor para campos e anomalias magnéticas de baixa intensidade, 100 a  $10^5$  Gauss. Utilizamos um Oscilador Robinson com varredura de 1 a 100 Mhz, permitindo alta precisão em nossas medidas. As amostras utilizadas têm espessura entre 100 e 550 nm, apresentando transição de fase estreita vista pela curva de caracterização (susceptibilidade magnética em função da temperatura). Devido a alta qualidade das amostras, o sinal de absorção, também em função da temperatura, apresentou apenas um pico na transição, como consequência do efeito Meissner. Introduzindo defeitos mecânicos (riscos) na amostra, simulamos granulação na mesma. Neste caso, observamos um alargamento e aumento na intensidade da absorção. Acreditamos que essas mudanças na absorção são devidas aos muitos contornos ou interfaces intragranulares. Sendo assim, aparecerão interações coulombianas entre as supercorrentes que farão com que a amostra absorva mais energia da bobina de modulação, agora no estado supercondutor. Para medida de campos e anomalias magnéticas, utilizaremos deste fato pois o nosso interesse é de trabalhar a 77 Kelvin, onde nossas amostras estarão abaixo da temperatura de transição. Dos resultados encontrados, notamos que poderemos controlar a absorção a partir de uma configuração ideal da granulação, que iremos conseguir através de riscos na amostra.

(FAP-DF, CNPq)

## SEARCH FOR A Si-Nb-Au-O SUPERCONDUCTOR

*S.F. Durrant\*, A.C Peterlevitz\*\*, W.A. Picolo\*\*, I. Doi\*\* and V. Baranauskas\*\*,*

Laboratório de Processos de Plasma-DFA-IFGW\*,  
Departamento de Semicondutores, Instrumentos e Fotonica,  
Faculdade de Engenharia Elétrica\*\*,  
UNICAMP, 13083-970, Campinas, SP

*Key words:* Superconductivity, Nb, XPS

Niobium is known principally for its superconducting properties. In this work, we report a study of a layered silicon-niobium-gold-oxygen structure, a candidate superconductor. These specific elements have a similar electronic shell structure to the well known Y-Ba-Cu-O combination. For the present study, layers of Au and Nb were deposited onto Si substrates, annealed at 300 to 800 °C, and analyzed using X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and Auger electron spectroscopy (AES). Progressive ionic erosion of the surfaces of the samples revealed that the layered structure of the films remained unaltered following annealing at temperatures of 300 or 500 °C, but that this structure was destroyed by annealing at 800 °C. As revealed by AES, annealing at 800 °C produced distinct crystalline phases, some rich and some poor in Au. Measurements of the resistivities of the samples via the Hall Effect revealed values of around 2  $\Omega$ .cm, both at room temperature (about 25 °C) and in liquid nitrogen (-196 °C). Additional resistivity measurements at the temperature of liquid helium are in progress.

(CNPq)

## FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS SUPERCONDUTORES DO SISTEMA BSCCO

*Keizo Yukimitu e Cláudio Luiz Carvalho*

Departamento de Física e Química

Unesp - Ilha Solteira

**Palavras-Chave:** vidros, supercondutores, BSCCO

Depois da descoberta dos materiais supercondutores de alta temperatura crítica por Maeda, cerâmicas e vidros supercondutores de alta temperatura crítica tem sido pesquisados no mundo inteiro devido as suas importantes aplicações tecnológicas, principalmente, na área de eletrônica. Em alguns casos, os vidros supercondutores tem recebido especial atenção devido a sua maior flexibilidade do que as cerâmicas, embora para fabrica-los sejam necessárias temperaturas mais elevadas do que aquelas aplicadas às cerâmicas. Neste trabalho, fabricamos vidros a partir de pó comercial (Strem Chemicals Inc.) com características da fase de temperatura crítica 80K, ou seja, comumente denominada 2212. O material é submetido a um tratamento térmico, a uma taxa de aquecimento da ordem de 2°C/min em atmosfera ambiente é aplicada, até que o mesmo seja fundido em torno de 1200°C. Após permanecer nessa temperatura durante 1 hora o *melting* foi vertido sobre uma placa metálica de prata de tal forma a se ter uma brusca redução da temperatura e obter o estado vítreo. A caracterização elétrica desses vidros foi feita usando-se o método das quatro pontas dc. Os resultados mostraram a presença de pelo menos duas fases supercondutoras, a fase 2212 e outra em torno de 25K, que pode ser a fase 2201. Caracterização estrutural usando microscopia eletrônica também foi utilizada. Essas características permitirão que os vidros fabricados dessa forma sejam submetidos a uma nova etapa de estudo, ou seja, estudando-se a viscosidade dos mesmos poderemos fabricar fibras vítreas com o objetivo de aplica-las na transmissão de sinais elétricos a curtas distâncias.

(FUNDUNESP)

## PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE AMOSTRAS SUPERCONDUTORAS DE $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$

<sup>\*</sup>Passos, W. A. C.; <sup>\*</sup>Ortiz, W. A.; <sup>\*</sup>Araújo-Moreira, F. M.

<sup>^</sup>Leite, E. R.; <sup>^</sup>Longo, E.

Universidade Federal de São Carlos

Departamento de Física

<sup>\*</sup>Grupo de Supercondutividade e Magnetismo

<sup>^</sup>Laboratório Interdisciplinar de eletroquímica e cerâmicas

**Palavras-chave:** supercondutores,  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ , tratamento térmico

Amostras de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$  foram preparadas por cristalização a partir do amorfo. Óxidos de  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CuO}$  e carbonatos de  $\text{CaCO}_3$  e  $\text{SrCO}_3$  foram misturados fisicamente em quantidades estequiometricamente calculadas e calcinados para eliminação de carbono. Logo após esse processo, o pó resultante foi fundido em cadinho de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  e prensado entre duas placas de aço inox para formação da fase amorfa. As amostras foram tratadas termicamente em diferentes condições de tempo e temperatura. Sua caracterização estrutural foi realizada por difração de raios-x, microscopia eletrônica de varredura e microanálise química localizada. Para caracterização magnética foi utilizado um suscetômetro-AC, onde medidas de  $\chi_{AC}$  em função da temperatura determinaram a temperatura crítica das amostras. Medidas de  $\chi_{AC}$  em função do campo AC aplicado foram realizadas para aplicação do modelo exponencial de estado crítico<sup>(1)</sup>. Verificou-se que a variação do tempo e da temperatura de tratamento térmico alteraram a temperatura crítica das amostras e que elas apresentaram contaminação por alumínio durante o processo de fusão em cadinho de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , excluindo o cobre das regiões onde o alumínio se fixou. Tal contaminação não afetou a temperatura crítica das amostras, mas a transição supercondutora se alargou devido a essa contaminação.

<sup>(1)</sup> F. M. Araújo-Moreira and W. A. Ortiz, "Exponential critical state model applied to AC susceptibility data for Hc superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ ", submitted to Journal Applied Physics.

## PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE SUPERCONDUTORES DA SÉRIE

$\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\Delta}$  COM  $n=1, 2$

*Rubens de Andrade Jr.*, *Edson Roberto Leite* e *Wilson Aires Ortiz*  
\*Departamento de Física - UFSCar, \*\*Departamento de Química -UFSCar

*Palavras-Chave:* supercondutividade, Hg-Ba-Ca-Cu-O, preparação

O primeiro composto supercondutor desta série, o  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$  (Hg-1201), foi descoberto em meados de 1993 por Putilin e colaboradores e tem uma temperatura crítica ( $T_c$ ) de 94 K. Alguns meses após, Schiling e colaboradores sintetizaram os compostos  $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{6+\delta}$  (Hg-1212),  $T_c=126$  K, e  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$  (Hg-1223), com  $T_c=133$  K (o maior no momento). A preparação destes compostos pelo processo de reação no estado sólido só é possível em altas pressões (entre 18 e 50 kbar). Por isto, estamos utilizando na preparação das amostras de Hg-1201 e Hg-1212 a técnica de reação controlada sólido/vapor desenvolvida por Meng e colaboradores, com a qual podemos trabalhar em pressões baixas (~ 50 bar). Preparamos um precursor cuja composição nominal é  $\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_x$  e a seguir o reagimos com o Hg em uma ampola de quartzo selada. O Hg é introduzido na ampola na forma de HgO misturado com o precursor em algumas das pastilhas. Preparamos os precursores por duas rotas: a partir da reação no estado sólido dos carbonatos de Ba e Ca e óxido de Cu e a partir de uma solução de nitratos destes elementos. Todos os passos da preparação são conduzidos em uma "glove bag", em atmosfera de  $\text{N}_2$  seco, devido à elevada reatividade do precursor com a umidade do ar e com o  $\text{CO}_2$ . As amostras preparadas até o presente momento, com precursores obtidos a partir dos carbonatos, mostraram uma alta resistividade no estado normal e um baixo grau de pureza. A análise por difração de raios-X das amostras mostrou que os que os principais contaminantes presentes nas amostras foram o  $\text{BaCuO}_2$  e o  $\text{CaHgO}_2$  no caso do Hg-1212 e carbonatos de Ba no caso de Hg-1201. O trabalho está tendo continuidade com a utilização de precursores preparados a partir de nitratos.

(CNPq - FAPESP - FBB)

## SINTETIZAÇÃO DE SUPERCONDUTORES USANDO MATERIAIS FERROELÉTRICOS

*M. R. da Silva\**, *J. M. Neto* e *A. M. Luiz*

Instituto de Física, UFRJ, Caixa Postal 68 528, CEP 21 945,  
Rio de Janeiro, RJ, Brasil

\* Instituto de Ciências, EFEI, Caixa Postal 50, CEP 37 500-000  
Itajubá, MG, Brasil

*Palavras-chave:* ferroelétricos, supercondutores, resistividade

Em trabalho recente [1] foi sugerido o uso de materiais ferroelétricos dopados como candidatos para a sintetização de novos materiais supercondutores com temperaturas críticas elevadas. Com o interesse de verificar esta hipótese foram escolhidas duas matrizes ferroelétricas com alta polarização elétrica: o niobato de sódio e bário (BNN) e o niobato de estrôncio e bário (SBN). Tanto o BNN quanto o SBN são materiais ferroelétricos muito utilizados em aplicações de óptica não linear e apresentam mudanças estruturais a temperaturas acima da temperatura ambiente. Foram sintetizadas 12 amostras de niobato de sódio e bário dopadas com cálcio e cobre, o primeiro substituindo o sódio e o segundo substituindo o nióbio, e 12 amostras de niobato de estrôncio e bário dopadas com ferro (substituindo o bário) e cobre (substituindo o nióbio). Os materiais, com diferentes concentrações de dopantes, foram submetidos a diferentes taxas de oxigenação a  $850^\circ\text{C}$  em tempos variando de 72 h a 144 h. Foram obtidas medidas de resistividade e de análise termomagnética da temperatura ambiente até  $800^\circ\text{C}$ . Algumas amostras apresentaram alta condutividade à temperatura ambiente (em relação à matriz) e comportamento de semicondutor para temperaturas elevadas. Transições estruturais, típicas da matriz, e outras induzidas pela dopagem e pelo tratamento térmico combinado à oxigenação foram também observadas nas medidas magnéticas. Resultados para baixas temperaturas (até 4,2 K), em andamento, também serão apresentados.

[1] A. M. LUIZ, J. Mat. Sci. Lett. 14 (1995) 1109.

(UFRJ, Finep, CNPq)

## CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE MONOCRISTAIS DE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

*Raquel de A. Ribeiro, Marcos A. Avila e Oscar F. de Lima*  
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

*Palavras-Chave:*  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , Monocristais, Supercondutor

A preparação de monocristais de alta qualidade é muito importante para aplicações tecnológicas e o estudo das propriedades básicas dos supercondutores de alta  $T_c$ . A dificuldade de obtenção de monocristais de boa qualidade deve-se ao fato que estes materiais são altamente reativos causando contaminação nas amostras e as tornando inhomogêneas. Utilizamos neste trabalho o método de crescimento e extração em fluxo de BaO-CuO para elaboração de monocristais de  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , onde a proporção utilizada de Y:Ba:Cu foi respectivamente 1:6:18. Foram utilizados cadinhos de alumina e de ouro. Os monocristais crescidos em cadinho de alumina apresentaram contaminação por alumínio o que dificultou a oxigenação das amostras. Após vários tratamentos térmicos as amostras apresentavam uma transição magnética muito larga e um  $T_c$  de aproximadamente 80 K. Os monocristais crescidos em cadinho de ouro apresentam propriedades comparáveis às melhores amostras descritas na literatura, com largura de transição magnética menor que 2,0 K e  $T_c$  em torno de 92 K, sob campo  $H = 10$  Oe aplicado paralelamente ao eixo  $c$  do cristal. A caracterização por raio-x e análise metalográfica confirmam a pureza da fase. Através de curvas de magnetização DC versus temperatura ( $M \times T$ ) e campo aplicado ( $M \times H$ ), utilizando um magnetômetro SQUID, levantamos a Linha de Irreversibilidade (L.I.). Comparamos a L.I. que obtivemos com alguns modelos existentes na literatura e discutimos a adequação dos mesmos aos nossos dados. Apresentamos também um estudo sobre fluxo magnético retido na amostra que aparece no ramo FCW da curva  $M \times T$ .

(FAPESP, CNPq e CAPES)

## EFEITOS DA ADIÇÃO DA PRATA E DO CHUMBO NAS PROPRIEDADES SUPERCONDUTORAS DO $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

*Cristiana G. Gameiro, M. Virginia Barbosa, David Landinez Tellez,  
J. Albino Aguiar e J. M. Ferreira*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE, Brasil

*Palavras-Chave:* supercondutividade, óxidos supercondutores, composto supercondutor-metal

Estudamos em detalhes as condições de sinterização do sistema  $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  com adição de Ag e/ou Pb. Amostras cerâmicas de composição  $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  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  $\text{AgNO}_3$ . Em seguida são compactados e sinterizados a elevadas temperaturas em atmosfera de oxigênio. Os resultados das medidas de caracterização elétrica e magnética dos compostos obtidos mostram que para a adição da prata a otimização do processo de sinterização é alcançada quando a temperatura de sinterização é de 900° C durante 12 horas. Amostras sinterizadas abaixo ou acima dessa temperatura apresentam uma clara deterioração em suas propriedades supercondutoras. Similarmente, com adição de chumbo as propriedades supercondutoras são também função da temperatura de sinterização. Quando adicionamos simultaneamente Ag e Pb as condições de sinterização modificam-se e obtemos melhores propriedades supercondutoras do que as obtidas quando dopamos isoladamente com Ag ou Pb.

(CNPq, FINEP)

## DETALHAMENTO DE SUPORTES DE AMOSTRAS PARA MEDIDAS DE CORRENTE CRÍTICA ATÉ 1500 A.

*Durval Rodrigues Junior*

Departamento de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena

*Palavras-Chave:* supercondutores, correntes críticas, criogenia

No desenvolvimento de materiais supercondutores para aplicações em altas correntes e altos campos magnéticos, uma das principais tarefas é a caracterização de corrente crítica,  $I_c$ , que os condutores conseguem transportar sem dissipação de energia. Essas correntes podem alcançar valores tão altos quanto 1500 Ampères a baixos campos, dependendo do tipo, diâmetro e otimização do supercondutor. Então, o problema é realizar essas medidas em suportes de amostras configurados de tal maneira que toda a energia gerada nos condutores de corrente seja dissipada no banho criogênico, usualmente hélio líquido, e nenhuma parte chegue até as amostras, aquecendo-as e modificando os valores de  $I_c$ . O presente trabalho mostra o detalhamento, projeto e confecção de suportes de amostras para altas correntes. Em geral, os suportes podem ser divididos em 4 partes: 1) região externa ao criostato, em temperatura ambiente; 2) região entre o flange do criostato e o nível de hélio líquido; 3) região dentro do banho de hélio, a temperatura criogênica constante e 4) região de montagem das amostras. As equações de equilíbrio termodinâmico são resolvidas para cada região, com suas condições de contorno, fazendo com que a energia gerada localmente seja dissipada pelo banho ao redor do mesmo local. Com base nesses cálculos, foi construído um suporte de amostras utilizando-se barras de cobre eletrolítico com diâmetro calculado para a região 1, refrigeração forçada sobre fios de cobre sem esmalte para a região 2, fios de cobre esmaltado para a região 3 e chapas de cobre para a região 4. Para esta última região, resolveu-se o problema da distância de transferência de corrente para os filamentos supercondutores. O suporte de amostras foi utilizado com sucesso até correntes de 1500 A, sem qualquer aquecimento indireto das amostras. Foi analisada a evaporação de hélio devido ao suporte de amostras+amostras e os valores experimentais obtidos estão muito próximos dos calculados no detalhamento do sistema.

(CNPq/RHAE, Brasil)

## CARACTERIZAÇÃO DE FILMES ESPessos SUPERCONDUTORES DE YBaCuO

*Alfredo Gonçalves Cunha, Marcos Tadeu D'Azaredo Orlando, Carlos Larica\*,  
Francisco Guilherme Emmerich\* e Elisa Baggio-Saitovitch*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ,

\*Departamento de Física - CCE - Universidade Federal do Espírito Santo

*Palavras-Chave:* filmes espesso supercondutor, suscetibilidade, resistividade ac

Estudamos as características de 05 filmes espessos ( $\approx 100\mu\text{m}$ ) supercondutores de YBCO produzidos pela técnica de Plasma Spray. Algumas propriedades físicas desses filmes foram medidas, mais especificamente a resistividade AC e DC, a suscetibilidade magnética AC bem como características cristalográficas (Raio-X). Devido a geometria das amostras produzidas, não foi possível obter nos suscetômetros usuais sinais com a resolução desejável sem destruir os filmes depositados. Assim utilizamos uma configuração distinta da usual para medir a suscetibilidade AC dos filmes.

Para produzir tais filmes utilizamos precursores óxidos e um carbonato com pureza de 99,9%. O material supercondutor para cada filme foi preparado seguindo uma mesma metodologia, a saber: duas calcinações de 12 horas a  $980^\circ\text{C}$  intercaladas por moagem com monitoração da granulometria, uma terceira calcinação de 12 horas a  $980^\circ\text{C}$  seguida de oxigenação durante 24 horas a  $480^\circ\text{C}$  com vazão de oxigênio controlada (resolução de  $10^{-6}$  kg/s). O material assim produzido foi novamente moído sendo que o diâmetro médio do grão obtido foi de  $\phi < 63\mu\text{m}$ . Após a seleção do diâmetro dos grãos, cada lote de material produzido foi caracterizado através da medida da suscetibilidade AC e a densidade verdadeira (Multi-picnômetro). Cada lote de pó de YBaCuO foi depositado em substrato de alumina de 01mm de espessura através da técnica de Plasma Spray. Medidas de suscetibilidade AC revelaram a presença da fase supercondutora no material depositado, sem que fosse necessário um novo tratamento térmico.

(CAPES)

## SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS DE ALTA PRECISÃO PARA CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

Inácio Bianchi, Unesp-FEG-DEE, Guaratinguetá-SP  
Samuel E. de Lucena, Unesp-FEG-DEE, Guaratinguetá-SP  
Carlos Y. Shigue, Faenquil-DEMAR, Lorena-SP

*Palavras-Chave:* aquisição de dados, caracterização, materiais

Este trabalho apresenta um sistema de aquisição de dados de baixo custo, baseado no microprocessador de 8 bits Zilog Z80, projetado e montado visando aplicações que requeiram geração de passos de corrente e leitura de tensão com alta precisão, tais como: caracterização de metais, materiais supercondutores, materiais amorfos, semicondutores, ou qualquer medida que necessite uma curva característica  $V \times I$  precisa. A fonte de corrente do sistema é interfaceada por um conversor D/A de 16 bits que, operando no modo unipolar, permite a variação da corrente na amostra de zero até o fundo de escala (100 mA), em passos de 15 ppm. Um conversor A/D de 16 bits permite a leitura da tensão sobre a amostra com a mesma precisão. O sistema conta com um *buffer* de 32 kbytes, o que permite o armazenamento de até 16 mil amostras de 16 bits cada, uma saída analógica que pode ser usada para visualização do sinal adquirido em um osciloscópio, uma porta serial bidirecional no padrão RS232D, que serve para receber comandos de um microcomputador IBM PC compatível, ou para transmitir os dados para o PC no padrão ASCII para armazenamento em disco, permitindo posterior visualização e tratamento matemático. Pode operar no modo independente do micro, enviando os dados do a saída analógica para um registrador, ou qualquer dispositivo que tenha entrada no padrão RS232, possuindo para isso uma interface com o usuário baseada em uma entrada de três teclas e saída visual através de um LCD de 16 caracteres alfanuméricos.

## A INFLUÊNCIA DA ORIENTAÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO APLICADO NAS MEDIDAS DE SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA AC DE FILMES SUPERCONDUTORES.

*Cláudio Luiz Carvalho*  
Departamento de Física e Química  
Unesp - Ilha Solteira  
*Cláudio José Magnon e Ruberley Rodrigues de Souza*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais  
IFSC - São Carlos

*Palavras-Chave:* supercondutor, filme, susceptibilidade magnética

As pesquisas com materiais supercondutores de alta temperatura crítica tem aumentado sensivelmente devido a sua importância em áreas tecnologicamente estratégicas, tais como, a médica, a eletrônica e a de transportes. Filmes supercondutores do sistema Bi: Sr: Ca: Cu: O foram feitos usando-se a técnica *paint-on*. Filmes espessos foram fabricados a partir de um pó proveniente da trituração de uma pastilha que apresentava características da fase 2223. O pó foi misturado a um veículo orgânico (a base de etil celulose), e espalhado com uma espátula sobre substratos de MgO. Medidas da resistência elétrica indicaram uma temperatura crítica em torno de 80K, o que significa a presença da fase 2212. Usando a mesma técnica estimamos a densidade de corrente de transporte da ordem de  $1000 \text{ A/cm}^2$  (6K); XRD, SEM e EDX, foram algumas técnicas utilizadas na caracterização desses filmes. Um estudo da susceptibilidade magnética, considerando a orientação do campo aplicado, paralela e perpendicularmente a superfície do filme, também foi feito, com o intuito de se determinar a fração da fase supercondutora predominante. Os resultados indicaram a fase 2212 como sendo a fase predominante.

(FAPESP, CNPq)

## EXPANSÃO TÉRMICA E CALOR ESPECÍFICO DE COMPÓSITOS SUPERCONDUTORES YBaCuO/Ag

*Claudia Maria Haetinger<sup>(a)</sup>, Ildemán Abrego Castilho<sup>(b)</sup>, Júlio Vitor Kunzler<sup>(a)</sup>, Luis Ghivelder<sup>(b)</sup>, Paulo Pureur<sup>(a)</sup>*

*(a) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul*

*(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro*

**Palavras-chave:** dilatômetro capacitivo, expansão térmica, YBaCuO

Neste trabalho descrevemos a construção e operação de um dilatômetro capacitivo formado por duas placas paralelas que apresenta uma resolução em  $\delta l/l$  melhor que  $10^{-7}$ . O dilatômetro foi confeccionado em cobre e opera em configuração normal, no intervalo de temperaturas entre 4.2 e 140K. Este equipamento foi utilizado em um estudo da expansão térmica em baixas temperatura de supercondutores de alta temperatura crítica. São apresentados resultados de  $\delta l/l$  e do coeficiente de expansão térmica  $\alpha$ , em função da temperatura em uma amostra de YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> policristalino e para uma série de compósitos não-aleatórios do tipo YBaCuO/Ag x wt% (x= 6, 11, 23). Os resultados obtidos para o sistema YBaCuO são compatíveis com os dados disponíveis na literatura. Em temperaturas inferiores a ~35 K, foi possível analisar a expansão térmica das amostras estudadas em termos de uma contribuição eletrônica anômala e de uma contribuição do tipo Debye. A variação do termo de Debye ao longo da série mostra que ocorrem efeitos sistemáticos, relacionados ao conteúdo de prata nos compósitos. Mostramos também que efeitos extrínsecos, relacionados com a porosidade e a existência de micro-rachaduras nas amostras, são importantes. A associação de nossos resultados com medidas de calor específico dessas mesmas amostras permitiram a determinação do parâmetro de Grüneisen médio em função da temperatura. Mostramos que esse parâmetro é praticamente constante para temperaturas maiores do que 60 K e que seu valor aumenta sistematicamente com a concentração de prata nos compósitos.

(CNPq, FAPERGS, FINEP)

## ESTUDO DA RELAXAÇÃO MAGNÉTICA EM NIÓBIO SUPERCONDUTOR

*Claudio A. Cardoso, Marcos A. Avila e Oscar F. de Lima*  
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

**Palavras-Chave:** Relaxação Magnética, Supercondutor, Nióbio

O fenômeno da relaxação magnética em supercondutores de baixa temperatura crítica já foi muito estudado, sendo que o decaimento logarítmico da magnetização volumétrica,  $M=M(0)[1-kT/U \ln(1+U/t_0)]$ , onde  $U$  é a energia de ativação envolvida no processo de arrastamento de fluxo e  $t_0$  é interpretado usualmente como o inverso da "attempt frequency", é previsto pela teoria de "flux creep" de Anderson-Kim. Mais recentemente novos regimes de relaxação tem sido propostos para os supercondutores de alta  $T_c$ . Utilizando um magnetômetro SQUID nós fizemos inicialmente várias medidas da magnetização pelo tempo ( $M \times t$ ), temperatura ( $M \times T$ ) e campo ( $M \times H$ ) para uma barra de nióbio monocristalino cujas faces foram polidas quimicamente. A seguir nós submetemos a amostra a um lixamento controlado de forma a degradar a superfície e assim suprimir a barreira superficial. Da análise destes dois conjuntos de dados pudemos calcular a energia de ativação como função da temperatura e campo magnético, o que nos permitiu distinguir a contribuição superficial da volumétrica. Verificamos assim que a barreira superficial é fortemente assimétrica com relação a entrada e saída de fluxo da amostra, sendo seu efeito particularmente importante na região de altos campos e baixas temperaturas. Nesta comunicação também planejamos discutir a adequação de diferentes modelos para descrever a relaxação magnética observada. Em especial, analisaremos as possíveis causas para o comportamento não logarítmico na parte inicial das curvas de relaxação.

(FAPESP e CNPq)

## AVALIAÇÃO DA ESTABILIDADE E PROTEÇÃO DE MAGNETO SUPERCONDUTOR DE NbTi E Nb<sub>3</sub>Sn DE 12T

Carlos A. Baldan<sup>1,2</sup>; Carlos Y. Shigue

<sup>1</sup>Departamento de Engenharia de Materiais, Faculdade de Engenharia Química de Lorena - SP

<sup>2</sup>Departamento de Engenharia Elétrica, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, UNESP - SP

*Palavras-Chave:* supercondutor, magneto, estabilidade

A estabilidade e proteção de um magneto supercondutor constituído por três bobinas cilíndricas concêntricas é analisada com a finalidade de otimizar os seus parâmetros geométricos, elétricos e térmicos. O magneto supercondutor de 12T contém uma bobina de inserção de Nb<sub>3</sub>Sn e duas bobinas de NbTi, sendo uma principal e outra de correção, arrançadas em série e alimentadas por uma corrente de 147A. O sistema de proteção é constituído por resistores fixos colocados em paralelo a cada uma das bobinas e por um esquema de proteção *quench-back* consistindo de um circuito detector de *quench* baseado em diodos, através do qual, uma parcela da corrente do magneto é derivada para excitar resistências de aquecimento enroladas em torno de cada uma das bobinas. O *quench* do magneto supercondutor foi analisado por um programa de simulação no cálculo do volume de zona normal, voltagem interna das bobinas, voltagem entre terminais, resistência, corrente e temperatura. Os parâmetros adotados para a simulação foram: tensão total do magneto 500V, constante de decaimento igual para as três bobinas e velocidade de propagação de zona normal adiabática. Os resultados obtidos são: temperatura máxima de *quench* <300K, voltagem máxima 3800V e constante de tempo 0,08s. A bobina de correção de NbTi, pelo fato de apresentar valores elevados de resistência e indutância, requer o emprego de resistência de proteção menor do que o adotado nos parâmetros acima. Isto deve-se ao fato da matriz do condutor da bobina de Nb<sub>3</sub>Sn ter baixa razão cobre/supercondutor, ocasionando rápido decaimento da corrente.

## TRANSFERÊNCIA DE CARGA ENTRE ÁTOMOS E SUPERFÍCIES SÓLIDAS: O PAPEL DA ESTRUTURA ELETRÔNICA

Rafael T. Pepino; George G. Kleiman  
Departamento de Física Aplicada - IFGW - UNICAMP

*Palavras-Chave:* estrutura eletrônica, interação átomo-superfície, transferência de carga

Os processos de troca de elétrons que ocorrem na interação entre átomos e superfícies sólidas são importantes no entendimento de experimentos, tais como *ion-beam scattering spectroscopy (IBSS)*, *neutral beam scattering spectroscopy (NBSS)* e *secondary-ion mass spectroscopy (SIMS)*. Durante a interação átomo-superfície, as ocupações dos estados eletrônicos, tanto do átomo como da superfície, podem variar no tempo. O átomo pode ser então ionizado ou neutralizado, enquanto a superfície passa a apresentar um espectro de excitações. Blandin et al. (J. Phys. 37, 369) desenvolveram um formalismo adequado para tratar perturbações dependentes do tempo e localizadas em metais, aplicando-o ao problema de transferência de carga na interação átomo-superfície metálica. Nesse tratamento, o Hamiltoniano de Anderson foi utilizado para descrever o sistema eletrônico e os resultados foram obtidos para um limite de Banda Larga. Os trabalhos posteriores seguem esta linha, incluindo efeitos de temperatura, variação temporal de energia atômica e trajetórias realistas. Tratamos dois novos modelos para a estrutura eletrônica da superfície, que podem ser combinados com o modelo de Banda Larga. No modelo de Dois Níveis, a densidade de estados no sólido é muito estreita, correspondendo a apenas um estado eletrônico do sólido interagindo com o estado atômico. No modelo de Banda Lorentziana, a densidade de estados tem um centróide e uma largura, correspondendo a um conjunto limitado de estados eletrônicos da superfície interagindo com o estado atômico. Este último modelo é o mais abrangente, sendo os outros dois casos, limites deste. Uma comparação entre os modelos permitirá um melhor entendimento do papel da estrutura eletrônica da superfície nos processos de transferência de carga. Em particular, é importante entender como a transferência de carga depende dos parâmetros relevantes, a saber: *energia do estado atômico, energia do nível de Fermi da superfície, intensidade da interação e trajetória atômica.*

## ESTUDO DA SUPERFÍCIE (0001) DO $\text{Bi}_2\text{Te}_3$

N.G. Teixeira, V.B. Nascimento, E.A. Soares e V.E. de Carvalho  
Depto. de Física, ICEX, UFMG

*Palavras Chave:* Superfície - LEED - Telureto de Bismuto

A possibilidade de fabricação de dispositivos semicondutores com propriedades termoelétricas mais apropriadas em aplicações tecnológicas - como por exemplo em resfriamento com dispositivos de estado sólido (efeito Peltier) e no uso de contatos de ponto (quântico) como termômetros miniaturizados - tem aumentado o interesse na pesquisa de novos materiais e/ou sistemas com propriedades termoelétricas melhoradas. Nos últimos anos, importantes investigações tem sido realizadas principalmente em filmes finos e interfaces semicondutor-semicondutor. Entre os vários materiais conhecidos nesta área destacam-se o  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  e o  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  devido suas marcantes propriedades termoelétricas. Embora estes compostos semicondutores já tenham sido estudados sob vários aspectos, as propriedades das faces destes cristais ainda não são totalmente conhecidas. O estudo dessas superfícies são importantes para o desenvolvimento de sistemas de baixa dimensionalidade que apresentam propriedades termoelétricas relevantes. Neste trabalho apresentamos um estudo detalhado da geometria e estrutura eletrônica da face (0001) de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  e  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  através das técnicas da espectroscopia de elétrons Auger, XPS e Difração de Elétrons Lentos (LEED). O comportamento desta superfície sob a deposição de monocamadas de metal é também apresentado.

(CNPq, Fapemig, Finep)

## SIMULAÇÃO DE CURVAS DE TPD PELO MÉTODO MONTE CARLO

*Angela Sanches Rocha, Ernesto Lopes dos Santos e Caio Mário Castro de Castilho*  
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

**Palavras-Chave:** dessorção, simulação, Monte Carlo

A Dessorção Térmica Programada (Thermal Programmed Desorption - TPD) consiste na dessorção de moléculas adsorvidas em um substrato sólido, mediante estímulo térmico e consequente medida da variação temporal da taxa de emissão de partículas. A temperatura da amostra é feita variar com o tempo segundo um critério pré-determinado, usualmente uma função linear. As curvas obtidas experimentalmente possibilitam a determinação de parâmetros importantes relativos à cinética das reações de dessorção. A variação temporal da taxa de cobertura (sítios ocupados / número total de sítios) é usualmente representada pela equação de Arrhenius. O Método Monte Carlo foi utilizado para a simulação computacional destas curvas. O procedimento utiliza um conjunto estatístico de sítios cuja energia adsorviva é conhecida. Para valores fixos de temperatura e cobertura, as posições dos  $N$  sítios ocupados no arranjo de sítios disponíveis são inicialmente sorteadas. Para cada molécula adsorvida, considerando a energia de interação da mesma com o substrato e com os seus possíveis primeiros e segundos vizinhos, simula-se a possibilidade de migração para um sítio vazio. O processo é realizado iterativamente por um certo número de vezes, o que corresponde à busca de minimização da energia. A solução do problema compreende duas etapas: i) na primeira o procedimento acima descrito é realizado para distintos valores de cobertura e de temperatura obtendo-se então conjuntos de valores para o número de pares de moléculas adsorvidas que ocupem as posições de primeiros (NV) e de segundos vizinhos (NNV) e para a energia configuracional (ECONF); ii) na segunda etapa, pela utilização dos valores de NV, NNV e ECONF que variam com a cobertura e com a temperatura, procede-se a integração numérica da equação de Arrhenius. A importância do número de iterações, representativas do processo de "busca do equilíbrio térmico" é demonstrada, bem como são discutidos aspectos como a variação do valor da "semente" inicial para a geração dos números aleatórios necessários ao processo, tempo computacional em função da cobertura e do número de iterações, entre outros. A comparação com a situação experimental é feita para Cl em Ni(111).

CNPq/UFBA

## MULTISTEP FORMATION ON InP SURFACES OBSERVED BY ATOMIC FORCE MICROSCOPY

*L.S.M.Souares, M.A.Cotta, C.A.C.Mendonça, K.M.Ito-Landers and M.M.G.de Carvalho*  
UNICAMP, IFGW, DFA/LPD, CP 6165, 13081-970, Campinas, SP

**Palavras-chave:** InP, surface steps, step bunching

Interfaces in semiconductor heterostructures constitute an important issue today, either from the point of view of basic knowledge or for applications in devices and design of new structures. The morphology of the surface and its evolution with time provide fundamental information on microscopic kinetic processes and growth modes. In particular, a two to three-dimensional growth mode transition and the corresponding surface evolution have been observed for InP homoepitaxial films. Even though the morphology of such films depends strongly on the growth mechanism, it can also be affected by the initial surface of the substrate prior to growth.

In this work we investigate by atomic force microscopy the morphology of InP substrates, with nominal (100) and  $2^\circ$  off towards the nearest  $\langle 111 \rangle_A$  (A-surface),  $\langle 111 \rangle_B$  (B-surface) and  $\langle 110 \rangle$ , prior to growth by chemical beam epitaxy. The substrates were degreased and etched using  $H_2SO_4$ -based solutions; the oxide was then desorbed under a  $P_2$  flux at  $530^\circ C$  for a period of time varying from 5 to 20 minutes. This last time period usually assures a good surface for epitaxy, according to *in-situ* high-energy electron diffraction measurements.

The substrate surface after the cleaning process present no defined structures, with rms roughness in the range 3-4 Å, independent of surface misorientation. After a 5-minute anneal, the nominal surface terraces are clearly reconstructed, and steps of the order of 2-3 monolayers in height are observed in the  $2^\circ$  off substrates. These multisteps are elongated in the case of the A-surface, while surfaces containing B-steps present a fingering structure, being almost granular in shape - and slightly larger in height - for the B-surface. The evolution of this surface reconstruction process is clear when the annealing time is increased to 20 minutes. While the nominal substrate presents very wide ( $\approx 1 \mu m$ ) terraces with small two-dimensional islands on top, the  $2^\circ$  off substrates show the presence of even larger multisteps ( $\approx 6-7$  monolayers for the B-surface) with granular shape. We will discuss this process of step bunching and its dependence on the type of surface termination (A or B steps) as well as its influence on the final InP film morphologies for the two-dimensional growth mode.

(Finep/FAPESP/CNPq/Telebras)

## DEPENDÊNCIA DA MORFOLOGIA DA SUPERFÍCIE DE AMOSTRAS DE (100) n-InP COM O POTENCIAL DE ATAQUE ELETROQUÍMICO

*Lucila Cescato e David Soltz\**  
Laboratório de Óptica - IFGW - Unicamp

*Palavras Chave:* fotoeletroquímica, semicondutores, morfologia da superfície

Foi observada uma forte dependência da morfologia desenvolvida nas superfícies de n-InP atacadas fotoeletroquimicamente com o potencial de ataque. Para potenciais mais positivos são formadas longas estruturas lineares alinhadas ao longo do eixo cristalino  $\langle 0-11 \rangle$ , estas estruturas com perfil em V são formadas pelos planos cristalinos (111) e (1-1-1) formados exclusivamente de In. Ataques desenvolvidos com potenciais mais negativos resultaram na formação de estruturas bidimensionais, alinhadas ao longo do eixo  $\langle 011 \rangle$ . Estas estruturas mais complexas foram analisadas em detalhe, e concluiu-se que eram formadas pelos quatro planos lentos de Índio e não apenas os planos (111) e (1-1-1) expostos à luz. Estes resultados foram explicados pela variação da distribuição da concentração de portadores minoritários fotogerados no eletrodo do semicondutor com o potencial de ataque. Utilizando-se um modelo sugerido por Ostermayer, a distribuição dos portadores minoritários foi calculada para alturas de barreira correspondentes às eficiências de recolhimento de portadores utilizados em nossos experimentos (potenciais de ataque). Os resultados do cálculo mostraram que para altos potenciais de barreira os portadores fotogerados são sugados rapidamente para a superfície e não difundem no interior do semicondutor enquanto que para os potenciais mais negativos o recolhimento de portadores é incompleto e uma grande porção deles difunde para o volume do semicondutor. Nestas condições para potenciais mais positivos apenas os planos de In iluminados podem ser atacados (resultando na estrutura em V observada) enquanto que para potenciais mais negativos todos os planos de In (inclusive os não iluminados) podem ser atacados resultando na estrutura mais complexa observada para baixos potenciais de ataque em nossos experimentos.

(FAPESP)

\* Dep. Chemistry, Colorado State University

## ESTUDOS POR FOTOEMIÇÃO E FOTOABSORÇÃO DE RAIOS X DO $V_2O_5$ E DO $Na_{0.33}V_2O_5$

*Alexandra Mocellin<sup>(1,2)</sup> Miguel Abbate<sup>(1)</sup>*  
(<sup>1</sup>)Laboratório Nacional de Luz Síncrotron  
(<sup>2</sup>)Instituto de Física/UNICAMP

*Palavras-Chave:*  $V_2O_5$ , XPS, XAS

Nós estudamos os compostos  $V_2O_5$  e  $Na_{0.33}V_2O_5$ , com fotoemissão e fotoabsorção dos níveis V 2p e O 1s, para observarmos as mudanças que ocorrem quando dopamos o  $V_2O_5$ . Os espectros de fotoemissão e fotoabsorção dos dois compostos estão desdobrados pelo acoplamento spin-órbita nos sub-níveis  $2p_{3/2}$  e  $2p_{1/2}$ . Cada um destes sub-níveis apresenta um pico principal e um pico satélite a maiores energias de ligação. O pico principal corresponde ao buraco interno bem blindado com uma configuração final do tipo  $2p^5 3d^1 L$  para o  $V_2O_5$  e  $2p^5 3d^2 L$  para o  $Na_{0.33}V_2O_5$ , onde L representa um processo de transferência de carga. O pico satélite corresponde ao buraco interno mal blindado com uma configuração final  $2p^5 3d^0$  e  $2p^5 3d^1$ , respectivamente. Comparando-se os espectros dos dois compostos observamos para o  $Na_{0.33}V_2O_5$  uma diminuição na intensidade do satélite e uma assimetria no pico do oxigênio devido a diferenças no processo de blindagem do buraco interno. Os espectros são analisados pelo modelo de cluster que permite calcular o valor da repulsão eletrostática entre os elétrons V 3d - V 3d. Nos espectros de fotoabsorção vemos que há uma forte hibridização dos orbitais 2p do oxigênio com os orbitais 3d e 4sp do metal, também podemos obter diretamente o valor do desdobramento dos orbitais 3d por campo cristalino, que é igual a 2.0 eV. Comparando-se os espectros de fotoabsorção dos dois compostos vemos que há um alargamento do pico  $e_g$  do  $Na_{0.33}V_2O_5$ , o que indica um aumento na dispersão das bandas devido a mudanças na estrutura cristalográfica.

## THERMAL WAVE STUDY OF BIOCERAMIC HYDROXYAPATITE

Antonio Carlos Bento<sup>(a)</sup>, Darryl P. Almond<sup>(b)</sup>

<sup>(a)</sup>Departamento de Física - UEM, Av. Colombo 5790, Maringá-PR, 87020-900, BRAZIL.

<sup>(b)</sup>School of Material Science - University of Bath, U.K.

**Keywords:** hydroxyapatite, thermophysical properties, thermal wave interferometry.

Thermal wave interferometry (TWI) has been used to study the calcium phosphate hydroxyapatite (HA). This is a biologically important mineral that has been extensively studied due its synthetic composition being an analogue of the mineral phase of bone. Some surgical applications of HA take the form of coatings which render a metallic substrate biocompatible. In this work HA has been deposited by plasma-spraying process. TWI was used for measuring the thermal diffusivity  $\alpha$ , conductivity  $k$ , effusivity  $e$ , volumetric heat capacity  $C_v$ , optical absorption coefficient  $\beta$ , and the thermal wave reflection coefficient  $R$ . The samples were prepared from a commercial powder with a particle size of 20-40  $\mu\text{m}$  and the substrate was titanium alloy Ti6Al4V which was grit blasted for cleaning and roughening before plasma spraying. Part of the surface was gold sputtered owing to produce an opaque region of HA for using the opaque approach of the theory. The measurements were performed for modulation frequencies covering the range from 0.5 to 30 Hz, crossing both region the translucent and the opaque one. Fitting the opaque data phase we obtained  $\alpha = 0.292 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  and  $R = -0.560$ . From the translucent data phase we have used the limiting value in the thermally thick region and according to the theoretical approach led us to  $\beta = 2.01 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$ . Using this value we derived the other parameters,  $k = 1.2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ,  $e = 2185 \text{ W s}^{1/2} \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ,  $C_v = 4.0 \times 10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ . Comparing with  $k = 0.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  and  $e = 935 \text{ W s}^{1/2} \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  for a human rib or to  $k = 0.8 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  and  $e = 1814 \text{ W s}^{1/2} \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  for the enamel of a human tooth, the result presented here are in good agreement with those. On average, human bone and enamel contain 41% and 92% of HA mineral by weight, respectively. In conclusion, as the degree of crystallinity and calcium phosphate phases in bone may vary greatly from those found in a plasma sprayed HA, with a similar chemical composition, the TWI has been shown to be very helpful for this kind of study, adding the non contacting and nondestructive feature of the technique.

(to appear in J.Appl. Phys. 1996)

(Apoio parcial CNPq)

## PROPRIEDADES ESTRUTURAIS, DINÂMICAS E TERMODINÂMICAS DE UMA CADEIA LINEAR SEMI-INFINITA ANARMÔNICA COM INTERAÇÃO ENTRE PRIMEIROS E NÃO PRIMEIROS VIZINHOS.

André Luiz C. da Silva, José Nicodemos T. Rabelo, Viatcheslav I. Zubov

Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

**Palavras-Chave:** 1) Superfície; 2) Anarmonicidade; 3) Interações de longo alcance

O caráter de longo alcance nas interações em uma cadeia monoatômica altera significativamente suas propriedades. Por exemplo, na teoria de ondas não-lineares a interação com segundos vizinhos pode provocar o surgimento de solitons infrassônicos. Neste trabalho estudamos os efeitos da interação de longo alcance nas propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas de superfícies de cristais anarmônicos no exemplo de uma cadeia linear semi-infinita monoatômica. Utilizamos a Aproximação do Campo Autoconsistente Não-Simetizado, cuja idéia central é a inclusão dos termos anarmônicos na energia potencial do cristal sem o emprego das expansões da teoria de perturbações. Cada átomo é descrito por uma função de distribuição localizada numa pequena região ao redor do sítio da rede, cada átomo se movimenta na presença de um potencial médio criado por todos os outros átomos. A partir da escolha de um potencial interatômico  $\Phi(r)$  resolvemos as equações para as funções de distribuição e obtemos a energia livre específica na aproximação de fraca anarmonicidade, ou seja fazemos uma expansão em potências da temperatura ( $\Theta = k_b T$ ) e dos coeficientes  $e_2/f r_0$ ,  $f_2/f$  e  $g_2/f^2 r_0$  ( $e_2 = \Phi'(2r_0)$ ,  $f_2 = \Phi''(2r_0)$ ,  $g_2 = \Phi'''(2r_0)$ ,  $f = \Phi''(r_0)$  e  $r_0$  é a posição de equilíbrio do átomo). Mantendo termos de até segunda ordem nestas expansões calculamos a dilatação térmica, a relaxação da cadeia na sua extremidade ("superfície"), as amplitudes efetivas e os calores específicos isocórico e isobárico. Para uma estimativa numérica dos resultados usamos os potenciais interatômicos de Morse e Lennard-Jones. Nos cálculos concretos consideramos interação de cada átomo com seus primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos. O caráter de longo alcance das interações implica em efeitos estáticos e acentua os efeitos anarmônicos e de superfície, além de aumentar a localização das funções de distribuição dos átomos na cadeia.

(CNPq)

## ESTAÇÃO EXPERIMENTAL PARA ESPECTROSCOPIA DE NÍVEIS PROFUNDOS

*Hélio Tolentino, Daniela Z.N. Cruz\*, Alexandra Mocellin\*, Flávio C. Vicentin, Miguel Abbate*  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS/CNPq  
Cx. Postal 6192, 13081-970 Campinas (SP)  
\* Mestrando UNICAMP

*Palavras-chave* : espectroscopia de raios X; luz síncrotron

Um grande avanço foi realizado no sentido de capacitar o LNLS com uma linha de luz para espectroscopia de raios X moles. No que tange a instrumentação, a ênfase foi dada à estação experimental e à definição do espelho focalizante toroidal. O espelho focalizante toroidal foi especificado através de simulações utilizando o programa Shadow e adquirido junto a Zeiss (Alemanha). A mecânica que suporta o espelho já foi montada e testada, mostrando facilidades para o alinhamento e boa estabilidade. Desenhamos, montamos e testamos a câmara de preparação de amostras e de medidas utilizando fontes convencionais de raios X moles (Al/Mg). A câmara, projetada e construída no LNLS, foi equipada (sistema de bombeamento, sensores de vácuo, manipuladores, etc...) com fundos de um projeto Fapesp. O analisador de energia de elétrons (Perkin-Elmer) foi adquirido com fundos de um projeto envolvendo a Comunidade Européia. Esta estação experimental para fotoemissão já está sendo usada para medidas de algumas amostras de óxidos de metais de transição. Espectros de várias amostras obtidos com este equipamento serão mostrados e discutidos. O desempenho geral do instrumento é comparável ao de equipamentos comerciais semelhantes. Com relação aos outros componentes da linha de luz, todas as partes do front-end já foram construídas ou compradas; o monocromador de duplo-cristais está construído e condicionado; o sistema de fendas foi projetado e está construído. Todas estas diversas partes serão instaladas e condicionadas em vácuo e estarão prontas para receber luz síncrotron no segundo semestre de 1996.

(LNLS, CNPq, CEE, FAPESP)

## SURFACE PLASMONS IN GRAPHITIC NANOPARTICLES

*Silvina Segui<sup>1</sup>, Odile Stephan<sup>2</sup>, Christian Colliex<sup>2</sup>, Daniel Ugarte<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>FaMAF, Univ. Nac. de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina.

<sup>2</sup>Lab. de Physique des Solides, Univ. Paris XI, Bât. 510, 91405 Orsay, France.

<sup>3</sup>Lab. Nac. Luz Síncrotron (CNPq/MCT), Cx. P. 6192, 13081-970 Campinas SP, Brasil.

*Key Words:* surface plasmons, EELS, graphite nanotubes

We report here a study of surface collective excitations (plasmons) in graphitic nanoparticles (bucky-tubes and bucky-onions). We use electron energy loss spectroscopy (EELS) to study multilayer carbon nanostructures generated with an electric-arc discharge apparatus. Spectra were acquired using a dedicated STEM (VG HB 501) providing a 0.5 nm electron probe, and using spectrum-line mode across the particles. In particular, two surface modes are observed at  $\approx 17$  and  $\approx 19.5$  eV, localized respectively at the external and internal surface of hollow carbon nanotubes. We have used classical electrodynamics theory to calculate the frequencies and excitation probability of surface modes in graphitic nanostructures. We have analyzed two configurations: a) penetrating electron trajectories in spherical particles; b) electron trajectories parallel to the axes of a cylinder. Electronic properties of the particles were modeled using an average of the diagonal elements of the dielectric tensor of graphite. Although these simplified models, theoretical predictions allow the interpretation of experimental results.

## DETERMINAÇÃO DE DUREZA E CONSTANTE ELÁSTICA DE MICROCRISTAIS DE $PbI_2$ POR NANOINDENTAÇÃO

*Autores: Wanderley Veiga e Carlos Mauricio Lepienski*

Departamento de Física UFPR

*Palavras-Chave:*  $PbI_2$ , nanoindentação, dureza

O iodeto de Chumbo ( $PbI_2$ ) é um cristal de estrutura laminar, que possui espessura micrométrica e contornos hexagonais. Depositados sobre lâminas de vidro, são amostras ideais para se realizar nanoindentação com vistas a medidas de dureza e constante elástica. Encontraram-se valores de dureza  $H < 0.2$  G Pa e módulo de Young  $E < 10$  G Pa. Além das medidas realizadas, deu-se ênfase, neste trabalho, ao estudo da morfologia das indentações, micrografadas com o auxílio de um microscópio eletrônico de varredura. A estrutura laminar do iodeto de chumbo, que apresenta ligações e Van der Waals para camadas adjacentes, produz efeitos interessantes com a utilização de um indentador Berkovich, de simetria 3, permitindo estudos de anisotropia superficial, além dos efeitos do substrato sobre as medidas. Os principais efeitos observados foram o aumento tanto da dureza quanto da constante elástica com o incremento da carga aplicada. As possíveis razões para esses fatos estão relacionadas com efeitos devidos à interação do substrato com a amostra e também com a movimentação para cima das camadas atômicas próximas às bordas da indentação.

## Reconstrução da Superfície de Pd(110) Devido a Presença de Enxofre Estudada por STM, LEED e AES

Carlos Achete

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais COPPE/UFRJ

Horst Niehus

Universidade Humboldt - Berlin

*Palavras-Chave:* STM, paládio, enxofre

Nos últimos anos tem sido grande o interesse em estudos sobre a adsorção enxofre sobre os mais diferentes metais como Ni, Fe, Mo, Cu e Pd. Este interesse advém da importância tecnológica, especialmente com respeito a aplicações em catálise. Neste trabalho apresentamos os resultados estruturais da adsorção de enxofre sobre Pd(110) utilizando as técnicas de Microscopia de Tunelamento de Varredura (STM), Difração de Elétrons de Baixa Energia (LEED) e Espectroscopia de Elétrons Auger (AES). A superfície do cristal de Pd foi preparada através de sucessivos ciclos de sputtering e aquecimento até que nenhum traço de contaminantes como carbono e oxigênio fosse detectado com a espectroscopia Auger (AES) e o padrão LEED se apresentasse (1x1) muito nítido. Em seguida a amostra foi aquecida a 900 °C e resfriada lentamente até a temperatura ambiente. Com este procedimento pode-se controlar a quantidade de enxofre que difunde do volume do cristal para a superfície. A quantidade de enxofre difundida foi controlada com AES. O padrão LEED obtido após o tratamento térmico é c(2x2) com pontos extras. Análises com STM em resolução atômica revelam que a superfície apresenta longos domínios c(2x2) que seguem em direção aos degraus monoatômicos.

## ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO COMPOSTO $\text{CuGeO}_3$ POR FOTOEMIÇÃO E FOTOABSORÇÃO

Daniela Z. N. Cruz<sup>(1,2)</sup> Miguel Abbate<sup>(1)</sup>, Hélio Tolentino<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

<sup>(2)</sup>Instituto de Física/UNICAMP

**Palavras-Chave:**  $\text{CuGeO}_3$ , XPS, XAS

Utilizando técnicas de fotoemissão e fotoabsorção, estudamos o composto  $\text{CuGeO}_3$  através dos espectros do nível Cu-2p, banda de valência e banda de condução. O  $\text{CuGeO}_3$  é um bom isolante a temperatura ambiente, sofrendo transição de spin-Peierls em torno de 14K. As medidas de fotoemissão foram realizadas no LNLS utilizando fonte convencional de raios X ( $\text{AlK}\alpha$ ), enquanto que as medidas de fotoabsorção foram obtidas com radiação síncrotron, no CAMD-USA. Os espectros da banda de valência e do nível 2p são similares aos de CuO. Nestes espectros, as bandas 3d do cobre estão separadas devido a interações eletrostáticas e efeitos de campo cristalino. A configuração iônica dominante no estado fundamental é  $3d^9$  misturado com pequena quantidade de  $3d^{10}\underline{L}$  ( $\underline{L}$  denota um buraco no ligante). O espectro do nível 2p apresenta um pico principal e um satélite em mais alta energia. O pico principal corresponde ao estado final  $\underline{c}3d^{10}\underline{L}$  enquanto que o satélite corresponde ao multiplete formado pelos estados  $\underline{c}3d^9$  ( $\underline{c}$  denota um buraco no nível 2p do cobre). O espectro da banda de valência também é composto por dois picos: um principal, formado de uma mistura dos estados  $3d^{10}\underline{L}^2$  e  $3d^9\underline{L}$ , e um pico satélite, em mais alta energia, de caráter predominante  $3d^8$ . Os espectros foram analisados usando o modelo de cluster, fornecendo informações sobre repulsão eletrônica, transferência de carga e hibridização ( $Q_{2p}=8.0\text{eV}$ ;  $U_{bv}=7.3\text{eV}$ ;  $\Delta=1.25\text{eV}$  e  $T=2.0\text{eV}$  para o  $\text{CuGeO}_3$ ). O espectro de fotoabsorção pode ser interpretado qualitativamente como uma combinação dos espectros do CuO e do  $\text{GeO}_2$ . O espectro apresenta um pico correspondente a hibridização Cu3d - O2p, e uma estrutura alargada em mais alta energia, correspondente a hibridização Ge4sp/Cu4sp - O2p.

## PROJETO E CONSTRUÇÃO DE UM ESPECTRÔMETRO DE MASSA DE ALTA RESOLUÇÃO

Cássia Ribeiro Ponciano, F. Eduardo Ávalos Cascante, Ricardo T. Cunha, Diogo V. de Andrade, Joaquim Jeronymo de Moura Filho e Enio Frota da Silveira

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

**Palavras-Chave:** refletor, desorção, tempo-de-voo

Um espectrômetro de massa de alto poder de resolução ( $m/\Delta m > 5000$ ) foi projetado e está sendo construído no Laboratório Van de Graaff desta Universidade. Trata-se de um instrumento tipo tempo-de-voo, munido de um espelho eletrostático, capaz de analisar íons desorvidos por impacto de projéteis energéticos (keV, MeV) ou por pulsos de laser UV. Um conjunto de programas para PC foi desenvolvido para projetar o espectrômetro (cálculo de trajetórias iônicas e otimização da resolução), permitir sua operação (transferência de dados do relógio digital para o PC) e analisar os resultados (análise de espectros de massa). As simulações que conduziram ao desenho definitivo do aparelho são discutidas. Espectros de massa preliminares obtidos com um protótipo são apresentados.

\* Doutorado sanduíche com a EPN, Quito, Equador e bolsista do IPS, Upsalla, Suécia.

(PADCT, CNPq e MCT)

## XPS USING Ti K $\alpha$ RADIATION AS THE EXCITING SOURCE, A STUDY OF THE 4D METALS

*R. Landers, A. Siervo, G.G. Kleiman and S.G.C. de Castro*  
Inst. de Física Gleb Wataghin Univer. Estadual de Campinas

*Keywords:* xps, 4d metals, Ti K $\alpha$

X-ray Photoelectron Spectroscopy is usually associated with surface studies and for this reason the choice of x-ray source is such that the kinetic energy of the photoelectron is relatively small so as to assure surface sensitivity. The great majority of conventional x-ray sources for XPS have Al or Mg anodes producing characteristic radiation with 1486.6 eV and 1253.6 eV energy respectively. In some cases it can be interesting to use higher exciting energies such as in studies of very deep core levels or segregation studies, in one case the higher energy allows one to access deeper energy levels and in the second the greater kinetic energy of the photoelectrons samples a thicker layer of the sample.

We present photoelectron spectra of the 4D metals excited with Ti K $\alpha$  radiation and compare them to the corresponding spectra taken with an Al anode. The Ti K $\alpha_1$  line has an energy of 4510.84 and a line width of 1.45eV, while the K $\alpha_2$ , half as intense is both wider (2.13eV) and lower in energy (4504.86 eV). For a meaningful comparison to be made it was necessary to deconvolute the Ti excited spectra to separate the effects of the complex x-ray line from the actual core level lines. Many interesting differences between the differently excited spectra are observed, including the striking effect of the change in the photo ionization cross-sections for the different core levels.

(FAPESP, CNPq, FINEP)

## VARIAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE VIDROS ALCALINOS CAUSADAS PELA MIGRAÇÃO IÔNICA, UTILIZANDO NANOINDENTAÇÃO

*Gilberto Yosimasa Odo, Ricardo Dalke Meucci, Carlos Mauricio Lepienski*  
Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná

*Palavras-Chave:* vidro, migração iônica, nanoindentação

Apresenta-se a técnica da nanoindentação para o estudo de propriedades mecânicas dos materiais, em especial, a determinação de dureza e módulo de elasticidade. Esta técnica consiste em fazer penetrar no material uma ponta de diamante do tipo Berkovich, com um controle simultâneo da carga aplicada e da profundidade de penetração. As resoluções na medição da carga e da profundidade são de 20  $\mu$ N (2 mg) e 0,4 nm, respectivamente. Utiliza-se desta técnica para o estudo da variação das propriedades mecânicas que ocorre em vidros alcalinos quando submetidos a alta tensão em corrente contínua. A aplicação de um campo elétrico externo entre as superfícies de um vidro alcalino provoca a passagem de uma corrente elétrica no seu interior, resultante do fenômeno da migração iônica, causando o aparecimento de três regiões de composição química distintas, a saber: uma, junto ao anodo, com ausência de íons alcalinos (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>); outra, junto ao catodo, com excesso destes íons, e finalmente a central que permanece inalterada. A espessura da camada de depleção de íons junto ao anodo é determinada pela carga total que passa pelo vidro. Foram aplicadas cargas de 50  $\mu$ N (5 mg) a 50.000  $\mu$ N (5 g), em amostras com espessuras de camadas de depleção de íons que variavam de 100 nm a 1.000 nm, gerando indentações com profundidades entre 10 nm e 700 nm. Os resultados obtidos mostram que os valores da dureza e do módulo de elasticidade, em relação à parte inalterada do vidro, são maiores na região do catodo e menores na região do anodo. Conclui-se que as medidas destas propriedades refletem, também, a variação da composição química nas diversas partes do vidro. Discute-se as suas implicações na utilização de vidros como isolantes de alta tensão em corrente contínua.

## METILAMINA COMO FONTE DE NITROGÊNIO NA DEPOSIÇÃO DE CAMADAS DURAS DE A-C(N):H POR PECVD

M.M. Lacerda, D.F. Franceschini, F.L. Freire Jr.  
Departamento de Física, PUC-RIO

*Palavras-Chave:* metilamina, nitreto de carbono, PECVD, propriedades mecânicas, estrutura

Camadas duras de a-C(N):H foram depositadas sobre substratos de Si(100) por "glow-discharge" autopolarizado em atmosferas de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>N (acetileno-metilamina). Os filmes foram obtidos a uma pressão total de 3 Pa, com potencial de autopolarização igual a -350V e com pressões parciais de metilamina entre 0% e 50%. Também foram realizadas experiências de deposição utilizando metilamina pura, a 10 Pa de pressão total e potencial de autopolarização igual a -500V. A composição química dos filmes foi determinada por RBS (carbono), ERDA (hidrogênio) e Reação Nuclear (nitrogênio), enquanto a estrutura foi monitorada através das espectroscopias de Raman e de Infravermelho. A tensão mecânica interna compressiva foi também determinada, por meio da medida da deflexão dos substratos após a deposição.

A incorporação de nitrogênio nos filmes ocorreu a níveis de até 15% atômico, para os filmes obtidos a partir de misturas de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>N. A tensão interna dos filmes foi reduzida de aproximadamente 50% com a incorporação de nitrogênio. Os espectros de Raman mostraram que a incorporação de nitrogênio resulta num aumento do tamanho ou número de aglomerados grafíticos, tendência geralmente observada na incorporação de nitrogênio em filmes de carbono amorfo, hidrogenados ou não. A taxa de deposição dos filmes sofreu um forte decréscimo com a adição de metil-amina ao plasma, decréscimo este maior que o esperado ao supor-se um processo de simples diluição de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> por C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>N. Os filmes depositados a partir de metilamina pura, bastante mais delgados que os obtidos a partir de misturas com acetileno, mostraram uma incorporação de nitrogênio de até 30 % atômico.

## CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE DIAMANTE POR ESPECTROSCOPIA RAMAN

A.R. Vaz e V. Lemos

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, 13083-970 Campinas  
N.F. Leite, N.G. Ferreira, V. J. Trava-Airoldi e E.J. Corat  
Lab. Associado de Sensores, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos  
T.M. Leite

Centro de Desenvolvimento de Tecnologia, São José dos Campos

*Palavras-chaves:* espectroscopia, caracterização, filmes de diamante

Espectroscopia Raman tem sido amplamente utilizada para caracterização estrutural de novos materiais. Em particular, no campo de recobrimento com diamante, é extremamente útil, e uma das únicas alternativas quando há necessidade de medições "in situ". Esta técnica fornece subsídios na definição da cristalinidade, presença de carbono amorfo com diferentes graus de ordenamento, estimativa do tamanho de grão, etc.. O escopo deste trabalho é a caracterização de filmes de diamante crescidos por dois processos CVD (Chemical Vapor Deposition): filamento aquecido, (HF), e plasma de microondas, (MW). Embora o crescimento assistido por HF seja mais difundido, não há ainda domínio completo dos parâmetros de crescimento. Uma série de filmes crescidos com concentração de CH<sub>4</sub> entre 0,5% e 4,0%, foi analisada. Os resultados mostram que a concentração ideal para este tipo de crescimento é de 2%. Pelo processo assistido por MW é possível recobrir superfícies maiores, inclusive usando substratos transparentes. Este avanço tecnológico, associado ao baixo custo, gera expectativa de aplicação na indústria espacial, para produção de janelas de satélites. O assunto estimulou uma avalanche de trabalhos, porém, o entendimento ainda é modesto. Aqui, serão apresentados resultados Raman para uma série de amostras crescidas por MW com concentração de O<sub>2</sub> variando entre 0% e 0,7%. Para esta série será discutida a competição entre a contribuição de diamante cristalino e carbono amorfo para a intensidade Raman.

(CNPq, FAPESP, FAEP-UNICAMP, INPE)

## MODELO EMPÍRICO DE NUCLEAÇÃO E CRESCIMENTO DE DIAMANTE POR DEPOSIÇÃO QUÍMICA A VAPOR

S.C. Trippe, M.C. Salvadori e M. Cattani  
Instituto de Física da USP, C.P. 66318, CEP 05389-970,  
São Paulo, SP

*Palavras-Chave: diamante, cvd, modelo*

O processo molecular de nucleação e deposição de diamante por deposição química a vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition) é bastante discutido na literatura, mas não existe um consenso a respeito deste assunto. A proposta deste trabalho é criar um modelo empírico no qual se determine alguns parâmetros experimentalmente, possibilitando a previsão da espessura de filmes de diamante para longos depósitos. Um aspecto muito estudado na literatura é o fato de diferentes preparações de substratos gerarem diferentes densidades de nucleação. Assim, um dos parâmetros empíricos a serem considerados neste trabalho será a grandeza  $\alpha$  definida como sendo o número de núcleos de diamante formados por unidade de tempo. Vamos supor que, para um dado conjunto de parâmetros de deposição, a taxa de crescimento de diamante (massa de diamante depositado por unidade de tempo) será proporcional a área de diamante exposta ao plasma. Assim, o parâmetro empírico referente a esta taxa de crescimento será:  $\xi$ , dado pela massa de diamante depositado por unidade de tempo e por unidade de área de diamante exposto ao plasma. Cálculos preliminares foram realizados para o caso particular de baixa nucleação, sendo que dados empíricos se mostraram coerentes com os resultados obtidos. A seguir serão feitas correções para alta nucleação, com o objetivo de possibilitar a previsão da espessura de filmes de diamante em longos depósitos.

(Este trabalho foi desenvolvido com o apoio do CNPq)

## FANO LINE SHAPE OF THE RAMAN SPECTRA OF BORON-DOPED DIAMOND FILMS WITH ACCOUNT OF INHOMOGENEOUS BROADENING

V. Baranauskas, A. Peterlevitz and G. I. Surdutovich,  
Depto de Semicondutores e Fotônica, FEE, UNICAMP, 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

*Palavras-Chave: Raman, diamond films*

The applicability of Raman spectroscopy as a characterization tool for synthetic diamond films prepared by chemical vapor deposition (CVD) is investigated. There is a one-phonon Raman line at  $1332 \text{ cm}^{-1}$  which it is directly related to the number of  $\text{sp}^3$  bonds (diamond content) and broad line at  $1550 \text{ cm}^{-1}$  corresponding to the  $\text{sp}^2$  bonds (graphite content). Since the intensity of the  $1550 \text{ cm}^{-1}$  line is about 50 times that of the  $1332 \text{ cm}^{-1}$  line, even small quantities of graphite impurities present in the diamond film can be detected. The Raman spectra of CVD diamond films doped with Boron exhibits changes in the linewidth and lineshape that are related to the sample's quality (size of microcrystallines) and the level of a doping. The diamond line shape  $I(\varepsilon)$  becomes asymmetric due to the quantum mechanical interference of a discrete transition (Raman phonon) with mixtures of

excited acceptor level and valence band states [1]:  $I(\varepsilon) = \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2}$ , where  $\varepsilon$  is a reduced frequency and  $q$  is the asymmetry parameter. The inhomogeneous broadening due to the microcrystalline structure may be approximated by a Gaussian function  $e^{-(\varepsilon/a)^2}$ , where  $\Delta\varepsilon = 2\sqrt{\ln 2} a$  is a full line width at half-intensity. The experimentally observed lineshape is given by the convolution of these functions. We calculated the lineshapes at different values of the parameters  $q$  and  $a$ .

[1]. Joel W. Ager III et al, Appl. Phys. Lett. 66(5), 616, (1995)

(CNPq)

## SISTEMA DE DEPOSIÇÃO DE DIAMANTE-CVD DE GEOMETRIA VARIÁVEL

*Angel fidel Vilche Peña e Silvio Alexandre de Araujo*

Faculdade de Ciências e Tecnologia - UNESP de Presidente Prudente, S.P.

*Palavras-Chave:* Diamante-CVD, deposição, micro-ondas

Os filmes de diamante apresentam muitas vantagens na proteção de peças e partes, devido fundamentalmente a suas propriedades de extrema dureza e ser inerte a quaisquer ataque químico convencional. O propósito deste trabalho é aproveitar mais uma das propriedades do diamante, o elevado gap óptico que o habilita para aplicações ópticas. Neste trabalho, o sistema de deposição foi desenhado para o crescimento de filmes de diamante-CVD para aplicações ópticas. O sistema proposto, consiste num cilindro de aço inox com duas janelas de observação e caracterização, nesta primeira versão são de pyrex mas podem ser utilizadas de quartzo. Possui uma flange móvel que permite alterar a configuração da cavidade ressonante para diferentes modos, iniciando-se pelo modo M021. Para isto, a antena do magnetrôn, colocada no centro da flange é isolada por uma mini-campanula de quartzo com uma pequena aba para fins de segurança. Os gases utilizados são uma mistura de hidrogênio, metano, tetrafluor carbono e oxigênio cuja composição é controlada por quatro fluxômetros de massa. O controle dos fluxímetros é feito manualmente ou através de uma interface 332 com um computador DX4 provido de um "software" especialmente desenvolvido para este fim. A qualidade do filme é analisada através de espectroscopia Raman e sua morfologia estudada por microscopia eletrônica de varredura. São mostrados quatro filmes feitos utilizando uma mesma mistura de gases, colocando a flange superior em diferentes posições de modo a selecionar os modos de ressonância. Falta ainda melhorar a transparência, atribuída fundamentalmente a impurezas, e também o tamanho do grão, dependente das condições de deposição.

(FAPESP e FUNDUNESP)

## NITRETO DE CARBONO - UM FILME DURO

*José Fernando Diniz Chubaci, Shiguo Watanabe, Jochen P. Biersack*

Departamento de Física Nuclear, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Kiyoshi Ogata, Akinori Ebe*

R&D Division, Nissin Electric Co. Ltd., Kyoto, Japão

Grande interesse tem sido demonstrado na síntese e caracterização de filmes finos de nitreto de carbono. Vários grupos de pesquisa têm dedicado grandes esforços para se conseguir a formação deste material e atingir as excelentes características estimadas pelos modelos teóricos. A técnica de deposição de vapor com simultâneo bombardeamento de feixes iônicos (IBAD - IVD) tem demonstrado êxito na preparação deste material. Em nossos experimentos, as propriedades dos filmes são controladas pela variação da energia dos íons de nitrogênio bombardeando o substrato e da razão de composição dos fluxos de C/N. Foram produzidas amostras com energia de íons entre 0.5 e 10.0 keV e com razão de composição C/N=0.5~3.0. Os filmes que obtiveram uma alta taxa de incorporação de nitrogênio (C/N=0.6~0.7) e formadas a baixas energias de implante iônico (<1.0 keV) apresentaram alta dureza Knoop de até 63 GPa. Medidas de XPS e FT-IR indicaram uma alta fração da ligação tripla C=N. A difração de raios-X demonstrou uma estrutura amorfa. Simulações computacionais pelo "T-DYN - Dynamic TRIM code" foram realizadas para se estudar os parâmetros de formação. A combinação das simulações contribuíram para se entender o processo de formação dos filmes finos de nitreto de carbono sobre substratos de Si, sílica fundida e WC.

(CNPQ, FAPESP, FINEP)

## EFEITO DA MISTURA DOS GASES REATIVOS E DA TEMPERATURA NA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DE FILMES DE Ti(C,N).

Lilian F. Senna<sup>(a)</sup>, Carlos A. Achete<sup>(a)</sup>, Fernando L. Freire<sup>(b)</sup> e Thomas Hirsch<sup>(c)</sup>

<sup>(a)</sup> Prog. Eng. Metalúrgica e de Materiais - COPPE/UFRJ

<sup>(b)</sup> Lab. van de Graff - PUC/RJ

<sup>(c)</sup> IWT - Bremen

A produção de filmes duros e super-duros de nitretos e carbonitretos de metais de transição já vêm sendo utilizada pela indústria para revestir componentes e ferramentas, a fim de lhes proporcionar melhorias em suas propriedades, tais como resistência mecânica, dureza e resistência à corrosão. Estas propriedades, porém, são bastante dependentes da composição dos gases reativos utilizados. Neste trabalho, filmes de Ti(C,N), foram produzidos via magnetron sputtering, com a composição gasosa variável. Utilizou-se um alvo de titânio e os gases reativos (metano e nitrogênio) foram introduzidos na câmara, através de controladores de fluxo. a temperatura foi mantida constante por meio de um controlador de temperatura. As análises químicas foram realizadas por meio de GDOS, Espectroscopia AUGER e RBS. Verifica-se que filmes produzidos com baixos teores de CH<sub>4</sub> apresentam-se sub-estequiométricos, enquanto que o aumento excessivo do fluxo deste gás durante o processo provoca uma acentuada elevação do teor de carbono, principalmente na superfície do filme. É válido ressaltar, contudo, que os filmes produzidos apresentavam alta dureza, em qualquer composição química avaliada. Por outro lado, a temperatura influencia muito pouco na composição dos filmes, com alguma variação apenas a temperaturas mais elevadas (400 °C). Com isso, podemos concluir que a mistura CH<sub>4</sub>:N<sub>2</sub> introduzida na câmara é fundamental para a obtenção de filmes de Ti(C,N) estequiométricos, que provavelmente irão manter-se razoavelmente constante para o intervalo de temperatura estudado.

## RECOBRIMENTO E TESTES DE FERRAMENTAS DE CORTE COM FILMES DE DIAMANTE

Suelene Silva, Maria Cecilia Salvadori, \* Ian G. Brown

Instituto de Física da USP

\* Lawrence Berkeley Laboratory - USA

*Palavras-chave: diamante, cvd, ferramenta de corte*

O uso da técnica de deposição química a vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition) para o crescimento de filmes de diamante tem ampliado as possibilidades de aplicação tecnológica para este material. A utilização de filmes de diamante como recobrimento de ferramentas de corte é um exemplo de aplicação, principalmente em se tratando de pastilhas para torno. Já é conhecido que o recobrimento destas pastilhas com filmes de diamante leva a um aumento significativo de sua vida útil, além de manter a qualidade de seu desempenho. Porém a adesão entre filme e substrato tem sido um fator limitante no recobrimento destas pastilhas. Uma das causas desta baixa adesão está ligada ao stress criado na interface por diferença do coeficiente de dilatação térmica entre filme de diamante e o substrato. Tratamentos da superfície do substrato para posterior depósito de diamante por CVD, como por exemplo: (i) polimento com pó de diamante, (ii) implantação iônica e (iii) camadas metálicas ou cerâmicas intermediárias, têm sido uma tentativa de solução para atenuar estas dificuldades. Neste trabalho foram usados um conjunto de ferramentas de carboeto de tungstênio (WC) e outro de nitreto de silício (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>). Nove diferentes tipos de tratamentos prévios usando carbono, titânio e tântalo foram realizados. As amostras são submetidas a um teste preliminar de ultrassom e aquelas que ainda mantêm o filme de diamante são utilizadas diretamente no torno usinando latão e bronze fosforoso. Em cada etapa dos testes as ferramentas são monitoradas por microscopia eletrônica de varredura.

(Este trabalho foi desenvolvido com o apoio da FAPESP)

## MEDIDAS DE STRESS EM FILMES DE DIAMANTE-CVD

Teófilo M. de Souza<sup>1</sup>, Vladimir J. Trava Airolidi<sup>2</sup>, Evaldo J. Corat<sup>2</sup> e Nélia F. Leite<sup>2</sup>

1-CDT/ DEMAR-Faenquil C. P. 111, 12242-800 São José dos Campos-SP

2-LAS/INPE, C.P.515, 12201-970 São José dos Campos-SP.

*Palavras Chave:* Diamante-CVD, Stress, Aderência, Espectroscopia Raman

Estudos de deposição de filmes de diamante-CVD em ambientes de pressões sub-atmosféricas e temperaturas relativamente baixas, têm sido bastante divulgados desde meados da década de 80. Suas propriedades singulares, as técnicas simples de obtenção e versatilidade de se obter em diferentes formas e tamanhos, abriram muitos caminhos para diferentes aplicações tecnológicas. Entre essas aplicações, um destaque especial tem sido dado para estudos de aderência do filme de diamante ao substrato. Os dois parâmetros que mais influenciam na aderência são a ausência, em geral, de ligações químicas do átomo de carbono da estrutura do diamante com o átomo do substrato, o "stress" que aparece no filme devido a dilatação térmica, que é diferente para o diamante e para o substrato, defeitos na estrutura cristalina, etc. Estes parâmetros podem ser estudados relacionando-os com os parâmetros de crescimento do filme, e com as características do substrato. No presente trabalho, procura-se enfatizar os estudos da dependência do "stress" que aparece no filme, com os parâmetros de obtenção do mesmo. Várias técnicas de medida de "stress" em filmes finos têm sido empregadas, entre elas, a de identificação, micro ranhuras, difração de raio-X, espectroscopia de espalhamento Raman, etc. Devido a excelente qualidade dos filmes obtidos em nossos trabalhos, com altas taxas de nucleação, optou-se por enfatizar o técnica de espalhamento Raman, cujo deslocamento e alargamento da linha característica de espalhamento, em relação ao diamante natural é um indicativo da presença de "stress". Os filmes de diamante foram depositados em substratos de silício <100> que possui coeficiente de dilatação térmica próximo ao do diamante. A técnica de crescimento utilizada foi a assistida por filamento quente. Verificou-se que a aderência depende da taxa de nucleação. Portanto é muito importante a técnica de preparação dos substratos para esse fim. O espectro Raman mostra ainda, que a aderência tem dependência com a concentração de hidrocarboneto na mistura, diminuindo a medida que se aumenta a concentração de metano. Notou-se, também, que pequenas quantidades de oxigênio na mistura melhora a aderência. A relação da aderência com o tamanho de grãos do filme para cada conjunto de misturas precursoras utilizadas foi, também, estudada.

## SONOELECTROCHEMISTRY OF CARBON FILMS: THEORY AND EXPERIMENT

M. Tosin, G. I. Surdutovich and V. Baranauskas

Depto de Semicondutores e Fotônica, FEE, UNICAMP, 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

*Palavras-Chave:* sonochemistry, Kapitza's pendulum

We present experimental and theoretical results of the investigations of carbon films growth by use of the sonochemistry method. In our experiments we used an ultrasound generator 20 kHz to 40 kHz frequency range and power up to 300W. It was observed more than ten times increase of film's growth rate under ultrasound influence. We suggest a theory to explain this effect in the framework of an original Kapitza's idea related to the effective potential of a pendulum with vibrating pivot [1]. In our case friction plays the predominant role under motion of carbon ions and the effective potential term  $\Delta U_{eff}$  takes different form from Kapitza's case known by

$$\Delta U_{eff} = \frac{\langle f^2 \rangle}{4m^2 \gamma \omega}$$

where  $\langle f^2 \rangle$  is the average of a square amplitude of the force at the frequency  $\omega$ ,  $m$  is the mass of moving particles and  $\gamma$  is the friction coefficient. Such renormalization of the force acting on the moving ions is essential at not so far-distant region from the substrate surface (electrode). In a near-distant region from the deposition surface mass contribution give effect of nonlinearity of the acting force. The main additional constant force is directed to the substrate and increases the flux of ions to the substrate. We investigate this effect as function of the frequency, amplitude of the external force, and film morphology.

[1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Mechanics, MIR, 1976

(CNPq)

## ESTUDO DO MECANISMO DE CRESCIMENTO DE DIAMANTE CVD A PARTIR DE $\text{CCl}_4/\text{H}_2$ COM O USO DE ESPECTROMETRIA DE MASSA NA IDENTIFICAÇÃO DE ESPÉCIES FORMADAS NO REATOR

Rita C. Mendes de Barros<sup>1</sup> (PG), Evaldo J. Corat<sup>2</sup> (PQ) e Koshun Iha<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup> Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA - CTA) - <sup>2</sup> Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE); São José dos Campos, SP. **e-mail:** rita@las.inpe.br.

**Palavras-chave:** espectrometria de massa, diamante CVD, compostos halogenados.

Metano e hidrogênio são os reagentes normalmente utilizados em diversos métodos de crescimento de diamante CVD (chemical vapor deposition), tais como filamento quente, plasma de microondas etc. No presente estudo, trabalhando-se com reator assistido por filamento quente de tungstênio, o metano foi substituído por tetracloreto de carbono. A ligação C - Cl do  $\text{CCl}_4$  é mais fraca que a C - H do metano, o que facilita a produção de hidrogênio atômico e a formação do radical metil, precursor do crescimento do diamante. Além disso, pode ocorrer a formação de radicais clorados, os quais agiriam como supressores da formação de ligações  $\text{sp}^2$  (grafite), indesejáveis na deposição de filmes de diamante. O reator foi acoplado a um borbulhador para tetracloreto de carbono (com duas linhas independentes para hidrogênio) e a um espectrômetro de massa Balzers interfaceado a um microcomputador. Foram feitos experimentos com variação nos diferentes parâmetros reacionais. Obteve-se espectros que fornecem subsídios para esclarecimento dos mecanismos de reação. A uma temperatura do filamento relativamente baixa ( $1800^\circ\text{C}$ ) ocorre grande dissociação do tetracloreto; a um patamar pouco mais elevado ( $2000^\circ\text{C}$ ), há dissociação completa; o sistema permanece estável a nova subida na temperatura ( $2200^\circ\text{C}$ ); desta maneira, pode-se depositar filmes a temperaturas menores com menos gasto de energia. Não há indicação de formação de radicais clorados, pela ausência dos respectivos picos de m/e; desta forma, o mecanismo seria realmente através do radical metil, não passando pelos intermediários de cloro. Estes resultados apontam como viável o uso de  $\text{CCl}_4$  em lugar do metano, num reator de crescimento de diamante CVD, em condições menos dispendiosas que o normal.

(FAPESP Proc. nº 94/3945-3)

## OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS PARA DEPOSIÇÃO DE FILMES DE DIAMANTE

André Paes de Almeida, Maria Cecília Salvadori.

Instituto de Física da USP - Caixa Postal 66318 - CEP 05389-970

**Palavras-Chave:** diamante, parâmetros, CVD.

A deposição de filmes de diamante é feita através de Deposição Química a Vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition) ativada por microondas. Os parâmetros de deposição são cerca de 10, incluindo concentração de cada um dos gases (Hidrogênio, Metano, Oxigênio e Monóxido de Carbono), pressão, temperatura e outros. Como resultado, basicamente deverão ser monitorados dois fatores: taxa de deposição e qualidade do diamante depositado. A otimização destes parâmetros de deposição é empírica, variando conforme características e configurações específicas do equipamento, não sendo possível sua obtenção através da literatura. Assim, se faz necessário um trabalho experimental sistemático que gere dados para a utilização de um software de otimização de parâmetros.

Para a realização deste projeto, além do sistema CVD a plasma de microondas disponível no Laboratório de Filmes de Diamante, estão sendo utilizadas basicamente duas técnicas de caracterização: microscopia eletrônica de varredura para o controle da homogeneidade e da taxa de crescimento do depósito; e, espectroscopia Raman para controle da qualidade do diamante depositado.

O software de otimização de parâmetros se utiliza de uma técnica (Projeto Experimento) que permite que um número mínimo de amostras seja suficiente para se formular uma correlação entre os vários parâmetros que caracterizam a montagem experimental e a amostra. Desta maneira é possível se ter uma previsibilidade sem ser necessário variar todos os parâmetros individualmente, o que, no caso de muitos parâmetros se torna muito trabalhoso.

Como ponto de partida para a determinação dos parâmetros de deposição, o Laboratório de Filmes de Diamante possui um arquivo com cerca de 200 folhas de controle de experimentos já realizados, que estão sendo analisados num software específico.

(Este trabalho foi desenvolvido com o apoio do CNPq)

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE BI-CAMADAS Ti(C,N)/a-C:H-Ti, DEPOSITADAS SOBRE AÇO RÁPIDO.

*Lilian F. Senna (a), Carlos A. Achete(a) e Thomas Hirsch(b)*

*(a) Prog. de Eng. Metalúrgica e de Materiais - COPPE/UFRJ*

*(b) IWT - Bremen*

"palavras-chave": camadas duras, aderência, magnetron sputtering

Há uma tendência geral para que o comportamento de ferramentas e componentes num ambiente agressivo (esforços múltiplos, corrosão, etc) seja principalmente determinado pelas propriedades da superfície do aço que os origina. Para manter e aumentar a vida útil das ferramentas, uma grande variedade de camadas duras e super-duras são usadas nas indústrias, em foco, o TiN, Ti(C,N) e filmes duros de carbono amorfo. Atualmente, o uso de multi-camadas e de filmes duros de a-C:H dopados com metal vêm sendo bastante estudado, a fim de contribuir para uma melhora mais acentuada deste comportamento. Como principal vantagem tem-se um aumento na aderência sobre aços, e propriedades mecânicas superiores às camadas simples. Neste trabalho, bi-camadas Ti(C,N)/a-C:H-Ti são produzidas por meio de magnetron sputtering. Utilizam-se metano e nitrogênio como gases reativos e os substratos são aços rápidos, com diferentes composições químicas. Análises de ultra-micro dureza e "scratch-test" foram efetuadas, a fim de verificar a performance destas camadas, em relação à dureza e à aderência, sobre os diferentes substratos. Observou-se que a dureza destas camadas era bem elevada, cerca de 2000mN ou mais. Em relação à aderência, contudo, verificou-se que os filmes produzidos sobre aços com maior quantidade de elementos de liga (M2) demoraram mais tempo para apresentarem falhas de aderência no "scratch-test". Porém estas falhas eram seguidas de muitas trincas. Por outro lado, os filmes produzidos sobre aços com maiores teores de carbono (C-45) falharam mais rápido. O tipo de falha, porém, apresentou-se como uma deformação plástica, sem que houvesse presença de trincas. Com isto, é possível concluir que este tipo de bi-camada pode vir a ser utilizada como revestimento de alta dureza para ferramentas, apresentando também boa aderência, sendo que o substrato irá influenciar de maneira decisiva neste tipo de propriedade.

## CARACTERIZAÇÃO DE DIAMANTE POLICRISTALINO ATRAVÉS DO EFEITO MIRAGEM

*M. S. Sercheli, A. M. Mansanares*

*Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP*

*N. F. Leite, E. J. Corat, V. J. Trava-Airoldi*

*INPE, São José dos Campos*

Palavras-Chave: efeito miragem, difusividade térmica, diamante policristalino

O diamante é um material de grande interesse tecnológico devido a certas propriedades intrínsecas, como alta rigidez e elevada difusividade térmica, podendo ser utilizado como escoador de calor. Portanto, a fim de caracterizar filmes de diamante policristalino, foi utilizada a técnica do efeito miragem, que tem por princípio induzir uma variação periódica de temperatura, em um ponto da amostra, com um feixe laser de Argônio (feixe bomba), e sondar o gradiente de temperatura criado nas vizinhanças deste ponto, através da deflexão de um feixe laser de Hélio-Neônio (feixe prova). Este, por sua vez, atravessa a região sempre paralelo ao plano da amostra e perpendicular ao feixe bomba. Os filmes de diamante são crescidos por deposição química a partir da fase vapor (CVD), assistida por filamento quente de Molibdênio à temperatura de 800°C, com 3.5% de volume de CH<sub>4</sub> e 0.7% de volume de CF<sub>4</sub> em H<sub>2</sub>. Devido ao fato da difusividade térmica do diamante apresentar valores muito altos, podendo variar de 2.5cm<sup>2</sup>/s a 15cm<sup>2</sup>/s, encontra-se dificuldades na sua caracterização, o que torna muito importante o conhecimento e análise de parâmetros experimentais críticos. Deve ser cuidadosamente controlada a distância feixe prova/amostra, assim como o diâmetro dos feixes, a frequência de modulação e a orientação do detector do feixe prova. Baseado nisto foram realizados cálculos e simulações, onde foram envolvidas situações diversas, como distância feixe prova/amostra variável, ou diferentes frequências de modulação, visando-se obter uma condição ótima do processo experimental, podendo assim, determinar-se com maior segurança a difusividade térmica do diamante policristalino crescido por CVD.

(CNPq, FAPESP)

## MEMBRANAS DE DIAMANTE AUTOSSUSTENTADAS

*M. C. Salvadori\**, *M. Cattani\**, *V.P. Mammana\**, *O. R. Monteiro\*\**, *J.W. AgerIII\*\** e *I. G. Brown\*\**

\* Instituto de Física da USP

\*\* Lawrence Berkeley Laboratory

**Palavras-Chave:** diamante, membranas

As propriedades físicas e químicas do diamante o tornam um material extremamente atrativo para diversas aplicações tecnológicas. A possibilidade de crescimento de filmes policristalinos de diamante, por deposição química a vapor (CVD - Chemical Vapor Deposition), sobre uma grande variedade de substratos, cresceu ainda mais o interesse por este material. Neste trabalho é descrito um método para obtenção de membranas autossustentadas de diamante, sendo que possíveis aplicações para este dispositivo incluem: janelas com alta transparência à radiação visível e infravermelho, ou membranas permeáveis de diamante quimicamente inertes para filtragens em meios agressivos. Os filmes de diamante foram crescidos em substrato de silício por deposição química a vapor por plasma produzido por microondas, e em seguida o substrato foi quimicamente removido. A originalidade do método está na forma de se dissolver seletivamente o substrato, isto é, uma parte anular do substrato é mantida para sustentação do filme. No método é utilizado um recipiente com O-rings, em vez de máscaras, permitindo uma dissolução isotrópica rápida e limpa de parte do substrato de silício. Como um exemplo do método, é descrita a obtenção de uma membrana de diamante de 10  $\mu\text{m}$  de espessura e 23 mm de diâmetro, com uma região central livre de substrato de 15 mm de diâmetro. As membranas de diamante foram caracterizadas por microscopia eletrônica de transmissão e varredura, difração eletrônica e espectroscopia Raman.

## EFEITOS DA ADIÇÃO DE $\text{O}_2$ DURANTE CRESCIMENTO DE DIAMANTE CVD COM QUALIDADE ÓPTICA

*N. G. Ferreira, E. J. Corat, V. J. Trava-Airoldi e N. F. Leite*

Laboratório Associados de Sensores e Materiais -LAS -INPE  
12201-970 São José dos Campos, SP

**Palavras-Chave:** Diamante CVD, Actinometria, Nucleação

A cinética química na formação de filmes de diamante CVD é de grande interesse científico devido à sua importância para várias aplicações tecnológicas, por suas propriedades ópticas e mecânicas. A qualidade e a textura dos filmes de diamante estão relacionadas tanto com a taxa de nucleação, que depende basicamente da preparação do substrato, como com as condições de crescimento dos filmes. O trabalho apresenta um estudo da taxa de nucleação e crescimento dos filmes de diamante CVD, sobre substratos de silício e quartzo, quando  $\text{O}_2$  é adicionado na mistura precursora. Os filmes foram crescidos em um reator assistido por microondas de 2,45 GHz e 700 W de potência; numa mistura de 99sccm de  $\text{H}_2$  e 1sccm de  $\text{CH}_4$ , com adição de  $\text{O}_2$  entre 0,1 a 0,7sccm. A temperatura de crescimento foi de 730° C e a pressão de 60 mbar. Os filmes apresentaram baixa rugosidade e transparência na região do visível ao infravermelho. O efeito da adição de  $\text{O}_2$  na fase gasosa foi monitorado "in-situ" por espectroscopia de emissão óptica, observando a variação da linha de hidrogênio atômico  $\text{H}\alpha$ , pela técnica de Actinometria. A qualidade e textura dos filmes foram estudadas por microscopia eletrônica de varredura, espalhamento Raman, difratometria de Raio-X e espectroscopia de transmissão no visível e infravermelho. Os resultados em emissão óptica mostraram que o aumento de H atômico, com a adição de  $\text{O}_2$ , depende da concentração de metano utilizada, devido à formação de CO que é uma espécie estável. Os filmes apresentaram tamanho de grão da ordem de 100 a 200nm, pico Raman em 1332  $\text{cm}^{-1}$ , característico do diamante, e alta cristalinidade. A adição de  $\text{O}_2$  em até 0.5sccm, melhora a cristalinidade dos filmes, evidenciando microcristais bem facetados, refletidos no espectro Raman pela diminuição da banda de carbono amorfo.

## ESTUDOS ESTRUTURAIS DOS FILMES a-CN:H PREPARADAS POR rf-SPUTTERING

Nelson Victoria, S.Souto e F. Alvarez

Laboratorio de Conversão Fotovoltaica - IFGW - UNICAMP - SP

*Palavras-Chaves: Carbono-nitrogênio, espectroscopia no infravermelho, XPS*

Em 1989, Liu e Cohen\* sugerem a existência de uma fase de carbono-nitrogênio tão dura quanto o diamante,  $\beta$ -C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. A partir deste trabalho original, filmes do sistema carbono-nitrogênio tem sido sistematicamente estudados. Nós estudamos o efeito da hidrogenação em filmes a-CN preparados por rf-Sputtering. Os filmes obtidos foram analisados pelas técnicas de transmissão no infra-vermelho (IR) e de fotoemissão por raio-X (XPS). Podemos observar uma grande influência do hidrogênio na formação do filme. A diminuição da concentração de nitrogênio e da taxa de deposição dos filmes com o aumento de hidrogênio no plasma, parece indicar a formação preferencial de ligações C-H e N-H diminuindo assim a reatividade do nitrogênio com os átomos de carbono. Esta hipótese é sustentada pela presença, nos espectros de IR, de duas bandas intensas entre 2850-3000 cm<sup>-1</sup> e 3200-3400 cm<sup>-1</sup> atribuídas às vibrações das moléculas CH<sub>x</sub> e NH<sub>x</sub>, respectivamente. Observamos também, um pico à 2200 cm<sup>-1</sup> devido à vibração stretching da ligação C≡N. A intensidade deste pico diminui com o aumento da concentração de hidrogênio. Os espectros de XPS dos níveis 1s C e 1s N apresentam quatro contribuições (picos de deconvolução) associadas aos diferentes entornos atômicos nos filmes. A proporção relativa de cada pico e a sua evolução como função da concentração de nitrogênio no filme é fortemente dependente da concentração de hidrogênio. A atribuição de cada pico é analisada em função destas variações. Evidenciamos a importância do papel do hidrogênio nas posições preferenciais ocupadas pelo nitrogênio na matriz dos filmes aCN:H. (CNPq, Fapesp)

\* A.Liu and L.Cohen; Science, **245** (1989) 841

### CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE DIAMANTE POR ESPECTROSCOPIA ELLIPSOMÉTRICA

N. Cella<sup>1</sup>, H. El Rhaleb, J.P. Roger, D. Fournier, E. Anger<sup>2</sup>, A. Gicquel<sup>2</sup>

Laboratoire d'Optique Physique, CNRS UPR A0005, ESPCI 10 rue Vauquelin, 75005 Paris  
França. <sup>1</sup>Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, C.P. 97282, 28601-970  
Nova Friburgo - RJ. <sup>2</sup>Laboratoire d'Ingénierie de Materiaux et des Hautes Pressions, CNRS UPR  
1311, Université Paris-Nord, Av. J.B. Clément, 93430 Villetaneuse, França

*Palavras-Chaves: elipsometria, filmes de diamante, índice de refração*

Os filmes de diamante são de grande interesse tecnológico devido as suas propriedades mecânicas, ópticas e térmicas. Vários métodos têm sido desenvolvidos para crescer esses filmes e muitas técnicas são utilizadas para suas caracterizações. Nesse trabalho, utilizamos a espectroscopia elipsométrica para caracterizar filmes de diamante com espessuras da ordem de 1 μm crescidos em substratos de silício, previamente preparados. Medidas elipsométricas *ex-situ*, utilizando um espectrômetro comercial, foram realizadas nas amostras crescidas por PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) sob diferentes condições como, temperatura de substrato e concentração de metano na composição gasosa. Um modelo óptico constituído de cinco camadas foi proposto para explicar os espectros elipsométricos obtidos para os filmes estudados. Tal modelo teve como suporte medidas prévias realizadas com outras técnicas de caracterização como, espectroscopia Raman, microscópio eletrônico de varredura e microscópio de força atômica. Com isso, simulamos opticamente o filme de diamante partindo de propriedades ópticas conhecidas do diamante, carbono amorfo, silício e ar. O modelo se mostrou sensível as rugosidades de interface e de superfície e a fase não-diamante do carbono presente nos filmes. A ambiguidade na determinação da concentração da fase não-diamante é discutida. A potencialidade do modelo é demonstrada com medidas ao longo da direção radial do filme, onde os parâmetros estruturais e ópticos do mesmo são obtidos.

CNPq (bolsa de pós-doutoramento)

## A QUADRUPLED DIODE-PUMPED Nd:FAP LASER AT 1.126 $\mu\text{m}$

*F.C.Cruz and J.C.Bergquist*

National Institute of Standards and Technology, Time and Frequency Division  
Boulder, CO, 80303, USA

**KeyWords:** diode-, solid-state laser, harmonic generation

The better inherent frequency stability of solid-state lasers, compared to other types of lasers, makes them attractive for precision spectroscopy and metrology. Here we report the development of a diode-pumped cw single-frequency quadrupled Nd:FAP laser at 1.126  $\mu\text{m}$  that will be used as a local oscillator for an optical frequency standard based on laser-cooled and trapped  $^{199}\text{Hg}^+$  ions. The development of a solid-state laser which is long-lived, compact, efficient and reliable will help make this optical frequency standard a practical device. The clock transition at 282 nm can be probed by the fourth harmonic of the Nd:FAP laser. Our crystal is cut, polished and oriented at Brewster angle to avoid AR coatings. The laser is built as a ring cavity, compensated for astigmatism. Thermal problems are largely eliminated by heat sinking the crystal in a tight copper support piece. Oscillation at the stronger line at 1.06  $\mu\text{m}$  is prevented by coating the output coupler to transmit 1% of the radiation at 1.126  $\mu\text{m}$  and 50% at 1.06  $\mu\text{m}$ . Unidirectional oscillation is enforced by a Faraday rotator and a quartz compensating plate. The laser oscillates at 1.126  $\mu\text{m}$  single-frequency and in the TEM<sub>00</sub> mode even without frequency selective elements. However a thin etalon was used for mode stability and tuning. A slope efficiency of 40% was obtained. Frequency doubling to 563 nm is done in a external cavity using either KNbO<sub>3</sub> or LiNbO<sub>3</sub>. Deuterated ADP (AD\*P) is used for doubling to 282 nm in a single-pass configuration. Since the free-running stability of the Nd:FAP laser is dominated by low frequency acoustical and mechanical noise, only a moderate speed servo system is needed to stabilize the laser frequency to the resonance of a high-finesse cavity with high precision.

## LASERS DE InGaAs/GaAs OPERANDO EM 980 nm - MODELAMENTO, FABRICAÇÃO E ESTUDO DO FUNCIONAMENTO EM REGIME MONOMODO TRANSVERSAL.

*A. Paradisi, A. C. Sachs, A. L. Gobbi, J.R. Filho, R.B. Martins, A. M. Machado*  
*CPqD Telebrás - Campinas - SP*

**Palavras chaves:** laser, simulação, alta potência

Lasers de semicondutor emitindo em 980 nm são fontes de luz adequadas para bombeamento de amplificadores ópticos a fibra dopada com érbio. Estes lasers precisam ter características que permitam acoplar alta potência óptica em fibras monomodo e ao mesmo tempo operar com baixa corrente para minimizar o aquecimento e os mecanismos de degradação. Nós fabricamos laser de poço quântico de InGaAs/GaAs, com estrutura de guiamento lateral tipo "ridge", emitindo em 980 nm, com e sem camadas refletora e antirefletora nos espelhos. Fizemos um simulador para a estrutura de guiamento levando em consideração o espalhamento de corrente, o efeito de "hole burning" espacial, bem como as perturbações que ocorrem no índice de refração e no ganho devido à não uniformidade na densidade de portadores, e densidade de fótons após o limiar. O modelo baseia-se na solução da equação de geração/recombinação de portadores na

camada ativa: 
$$\frac{J(x)}{qt_a} + D \frac{\partial^2 N(x)}{\partial x^2} = \frac{N(x)}{\tau} + B(N(x))^2 + C(N(x))^3 + g(N(x))\Psi(x)$$
, onde:  $J(x)$ ,  $N(x)$  e  $\Psi(x)$  são a

distribuição de densidade de corrente, de portadores e de fótons, respectivamente.  $t_a$  é a espessura da camada ativa,  $D$  é o coeficiente de difusão dos portadores,  $g(N)$  é o ganho óptico líquido. Para a determinação da corrente limiar, a tensão aplicada  $V_o$  é ajustada até que o ganho modal  $g_m$  se iguale à perda total na cavidade  $\alpha_c = \alpha_i - \ln(R_1 R_2) / 2L$ , onde  $\alpha_i$ ,  $L$  e  $R_{1,2}$  são: a perda interna, o comprimento do dispositivo, e as refletividades dos espelhos, respectivamente. Houve boa concordância com os resultados experimentais no que diz respeito a corrente limiar e potência óptica máxima de funcionamento em regime monomodo. O comportamento não linear da característica luz corrente (kink) foi inequivocamente identificado como o início da competição entre o modo fundamental e o modo TE de primeira ordem.

## ESPECTROSCOPIA DO Nd:YLF SOB EXCITAÇÃO COM LASER DE DIODO

L. C. Courrol, E. P. Maldonado, L. Gomes, N. D. Vieira Jr, I. M. Ranieri, N. M. P. de Moraes e S. P. Morato

Supervisão de Óptica Aplicada, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Caixa Postal 11042, Pinheiros, 05422-970, São Paulo, Brasil

*Palavras-Chave:* laser, espectroscopia, transferência de energia

O cristal de Nd:YLF exibe um baixo limiar e alta potência média em mono modo sendo utilizado em uma grande variedade de aplicações comerciais. A linha de absorção mais intensa do Nd<sup>3+</sup> encontra-se na região de 0.8  $\mu\text{m}$  e é perfeita para bombeio com laser de diodo, produzindo sistemas laser totalmente do estado sólido, compactos, inovadores e de alta potência. Devido a alta potência, os lasers de diodo originam processos não lineares de conversão ascendente, em sólidos dopados com íons de terras raras onde a radiação de bombeio, na região do infravermelho, pode ser convertida em luminescência no visível. A partir de uma investigação espectroscópica das propriedades de um cristal de Nd:YLF excitado com um laser de diodo de alta potência em 797 nm à 14 K, verificamos a presença de emissões anti-Stokes provenientes dos níveis superiores do Nd<sup>3+</sup> em 526 nm, 650 nm (<sup>4</sup>G<sub>7/2</sub>) and 585 nm (<sup>2</sup>G<sub>1/2</sub>). Essas luminescências anti-Stokes resultam da excitação por 2 fótons a partir do nível metaestável <sup>4</sup>F<sub>3/2</sub>. À temperatura ambiente, essa mesma excitação, dá origem a uma banda larga centrada em 530 nm atribuída à emissão radiativa do nível 5d dos íons de Ce<sup>3+</sup> "perturbados", presentes na matriz hospedeira como contaminantes, após a transferência de energia dos íons de Nd<sup>3+</sup>. Essas emissões observadas na região do visível são perdas para o sistema laser de Nd:YLF em 1.047  $\mu\text{m}$ , bombeado por laser de diodo em 797 nm. Nesse sentido o estudo dessas perdas é de grande interesse no desenvolvimento de lasers do estado sólido.

Apoio CNPq

## AMPLIFICAÇÃO E COMPRESSÃO SIMULTÂNEAS DE SINAIS FRACOS NA REGIÃO ANÔMALA DE DISPERSÃO BOMBEADOS POR UM SÓLITON FUNDAMENTAL

R. F. de Souza<sup>a</sup> e J. Miguel Hickmann<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Eletrônica-ETFAL, <sup>b</sup>Departamento de Física-UFAL

*Palavras-Chaves:* Sóliton, Compressão e Amplificação.

A amplificação e compressão simultânea de sinais surge da possibilidade de se combinar em uma fibra um amplificador Raman com um compressor óptico baseado no balanço entre a modulação de fase cruzada e a dispersão da velocidade de grupo. Esta técnica é modelada por um sistema de equações não lineares de Schrödinger acopladas que descrevem os efeitos de automodulação de fase, modulação de fase cruzada, espalhamento Raman estimulado e dispersão de velocidade de grupo na evolução dos pulsos. A diferença entre as frequências do bombeamento e sinal deve estar dentro da banda de ganho Raman, para garantir a transferência de energia. Assim, durante a propagação, o bombeamento amplifica o sinal através do espalhamento Raman estimulado e, ao mesmo tempo, induz sobre ele uma varredura de frequência positiva através da modulação de fase cruzada. A situação em que os comprimentos de onda do bombeamento e do sinal estão colocados simetricamente em relação ao mínimo de dispersão já foi estudada teórica e experimentalmente. Neste trabalho consideramos como bombeamento um sóliton fundamental, portanto propagando-se na região de dispersão anômala. O efeito do desbalanceamento de velocidade de grupo entre os pulsos nesta situação torna-se importante e, quando a duração do pulso de bombeamento é menor que a duração do sinal, acaba afetando positivamente a evolução do sinal. Durante a propagação o bombeamento passa por toda extensão do sinal gerando uma varredura simétrica a qual melhora consideravelmente o resultado final. Para uma razão entre a duração do sinal e do bombeamento igual a 8, obtivemos através de simulações numéricas um ganho de energia de 70 dB e um fator de compressão de 8,5 vezes para uma distância de propagação igual a dez vezes o comprimento de dispersão do sinal.

(CNPq, CAPES, FINEP)

## A VARIATIONAL ANALYSIS TO THE SOLITON PROPAGATION IN THE PRESENCE OF TWO-PHOTON ABSORPTION

S. Chávez Cerda<sup>a</sup>, S.B. Cavalcanti<sup>b</sup> e J. Miguel Hickmann<sup>b</sup>

<sup>a</sup>I.N.A.O.E., Puebla, Puebla, México

<sup>b</sup>Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

*Keywords: solitons, dissipation, variational*

The propagation of pulses and beam profiles under the action of two-photon absorption (TPA) has great interest nowadays, because the potential action of TPA as a limitation factor in switching devices using high nonlinearities. Variational approaches have been applied successfully to the problem of temporal dispersion and/or spatial diffraction in nonlinear propagation which is described by a nonlinear Schrödinger equation. These approaches are usually limited to conservative optical systems, due to mathematical difficulties that the dissipation term brings about.

The purpose of this study is to apply a variational technique to investigate dissipative nonlinear propagation. By means of the generalization of the Kantorovich method, suitable for non-conservative systems, we are able to deal with the problem of soliton propagation under the influence of TPA. Based on the characteristics of the exact solution in the absence of TPA, and supposing an adiabatic process we propose a family of soliton solutions as trial functions. This procedure results in analytical expressions that illustrate the changes during propagation of the soliton's parameters such as amplitude, width and phase. Comparison of the behavior predicted by our approximate solutions with numerical results available in the literature shows very good agreement.

In conclusion, a variational approach for non-conservative propagation has been used to provide a suggestive description for soliton propagation under TPA effect. As the problem of non-conservative propagation is shared by many areas of physics other than light pulse propagation, we emphasize that the present approach may be useful for a quite wide range of areas and different kinds of dissipative terms.

(CNPq, FINEP)

## CÁLCULO DE TEMPOS DE RELAXAÇÃO CRUZADA EM VIDROS DOPADOS COM Er<sup>3+</sup>

M.C.O. Aguiar, L.C. Barbosa e C.L. Cesar

Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas, SP

*Palavras-Chave:* Érbio, relaxação cruzada

Em fibras altamente dopadas o tempo de vida do íon Er<sup>3+</sup> depende fortemente da ocorrência de relaxação cruzada. O processo de relaxação cruzada envolve dois íons vizinhos no primeiro estado excitado <sup>4</sup>I<sub>13/2</sub>: um íon transfere sua energia para o outro, tendo como resultado um íon no segundo estado excitado <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> e outro no estado fundamental <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub>. O íon do estado <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> decai rapidamente para o estado <sup>4</sup>I<sub>13/2</sub> e, como consequência do processo de relaxação cruzada, temos a perda de um íon excitado o qual poderia ter amplificado um fóton. O objetivo deste trabalho é entender como a interação microscópica entre a matriz vítrea e os íons de Er<sup>3+</sup> controla o tempo de vida e o processo de relaxação cruzada, para experimentalmente buscar modificações químicas que permitam aumentar a concentração de Érbio sem o correspondente aumento da relaxação cruzada. A teoria de Judd - Ofelt tem sido utilizada para este tipo de estudo. Essa teoria considera que nos íons terra-rara a transição óptica é do tipo dipolo elétrico, que se torna possível apenas pela quebra de simetria devida ao campo cristalino no sítio do íon. Expandindo esse campo nos tensores esféricos obtêm-se a força do oscilador em termos de apenas três parâmetros Ω<sub>2</sub>, Ω<sub>4</sub> e Ω<sub>6</sub> que dependem da simetria, intensidade e distância dos dipolos elétricos vizinhos dos íons terra-rara, isto é, da matriz vítrea. A taxa de transferência entre íons devida a relaxação cruzada depende da concentração (distância interiônica) e do elemento de matriz para a transição entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Os únicos parâmetros que podemos variar para a obtenção de nosso objetivo são os Ω<sub>2</sub>, Ω<sub>4</sub> e Ω<sub>6</sub>. Estamos desenvolvendo um procedimento para calcular esses parâmetros e prever os tempos de relaxação cruzada para várias matrizes vítreas fabricadas em nosso grupo. Em particular para uma matriz de Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-PbO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-GeO<sub>2</sub> na qual o tempo de vida medido, com uma concentração de 10.000 ppm de Er<sup>3+</sup>, foi da ordem de 3 ms, apenas 3 vezes menor que o tempo de vida para fibras de sílica com concentração de 80 ppm de Er<sup>3+</sup> (a partir dessa concentração a relaxação cruzada começa a prejudicar a amplificação em fibras de sílica).

## CARACTERIZAÇÃO DE REDES SENOIDAIS EM FOTORREFRATIVOS

*P.A.M. dos Santos e G. Nader*  
Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

*Palavras-Chave:* fotorrefrativo, absorção, transferência de modulação

Cristais fotorrefrativos selenetos podem armazenar informação óptica gerando-se hologramas devido também a um mecanismo de absorção, resultando num processamento semi-permanente. Foram observadas evidências experimentais da geração simultânea de três redes senoidais, duas fotorrefrativas (fase) devido a elétrons e buracos e uma de absorção (amplitude) no volume do cristal. Neste trabalho apresentamos uma rápida e simples técnica de caracterização das redes fotorrefrativa de buracos e de absorção. Estas são obtidas utilizando-se um tempo de escrita em torno de cinco vezes o necessário para se gerar hologramas dinâmicos.

Utilizamos amostras  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  de 8mm de espessura, apenas em regime de difusão, em  $\lambda=0.633\mu\text{m}$ , com feixes de laser projetados na face de entrada (110), compensando-se a atividade óptica com um polarizador na entrada, sendo a polarização vertical no centro da amostra e o vetor da rede  $k_x$  perpendicular ao eixo  $\langle 001 \rangle$ . Bloqueando-se um feixe de escrita com um obturador mecânico, o decaimento da rede é obtido em três estágios distintos. O resultado experimental é obtido com a substituição do polarizador de entrada por uma lâmina de meia onda girando no feixe de prova para leitura do decaimento das redes. Neste caso, os três estágios do decaimento aparecem com uma modulação de intensidade devido à dependência da polarização na luz difratada quando ambas redes, fotorrefrativa de buracos e de absorção, estão presentes no volume da amostra.

Esta técnica é baseada nesta dependência efetiva da polarização dos feixes de escrita e do feixe de prova com a qual é possível caracterizar o fator de acoplamento de ambas redes. A principal vantagem deste método é a montagem experimental que consiste no controle simples e automático da variação da polarização do feixe de prova. Outros experimentos realizados com este intuito, têm utilizado montagens holográficas estabilizadas necessitando de complexo suporte técnico eletrônico.

## SILÍCIO OPTO-MECANICO

*F.Rudge Barbosa, F.Borin, H.Godoy, M.Finardi, Antonio Coral*  
CPqD - Telebras - Campinas SP

*Palavras chave:* Óptoeletrônica, Fibras Óticas, Semicondutores

Silicon has been widely known as a semiconductor material because of its electronic, thermal and mechanical characteristics. However, some new features have been added in recent years, especially due to increased applications and use in Optoelectronics. Crystalline silicon is extremely versatile as an opto-mechanical material, which can be used as plate, mirror, spacer, holder, as well as heat dissipating, material. Such properties are successfully being explored in optoelectronic packaging. The present work summarizes some of these opto-mechanical applications, including V-grooves for self-aligned fiber positioning, micro-mirrors, and fiber and laser array assemblies.

Throughout the work silicon is crystalline silicon oriented [100]. Silicon is an F.C.C. crystal which when sliced to give [100] wafers results in surprisingly tough material. It is mechanically and thermally "better" than almost any glass, and rivals several ceramics. Through selective chemical etching, the {111} planes are revealed at  $54,7^\circ$  with the {100} planes, leading to V-grooves and integrated mirrors. Intrinsic material ( $n \sim 10^{16}$ ) is preferably used, and a thin (1000Å) dielectric layer is deposited to control patterned chemical etching and to avoid undesired electrical contacts. Wafer thickness is typically  $400\mu\text{m}$ . Fabrication details and characterization results will be presented and discussed and new trends pointed out.

## Glass Integrated Optics by Ion Exchange

E. B. dos Santos, N. Aranha, O. L. Alves and L. C. Barbosa  
Universidade Estadual de Campinas  
P. O. Box 6165, CEP 13083-970, Campinas, SP

*Palavras chaves:* Guias de onda em vidros, troca iônica, dispositivos ópticos

Different techniques are used to make glass integrated optical devices. Ion-exchange is the most popular. This technique is simple and can be used to make reproducible and low loss-cost devices. In this work we show the influence of several variables in the process of ion exchange glass. The waveguides were produced in melt: 45 % NaNO<sub>3</sub>-45 % KNO<sub>3</sub> and AgNO<sub>3</sub> with concentrations between 10<sup>-4</sup> and 10 % wt. The temperature of 340 °C and 315 °C were used with exchange time of 60 minutes. The molten salts is held in a silica crucible which was kept at a constant temperature. The samples were characterized by the coupling prism method with a He-Ne laser to observe the modes guided. We did measure the effective refraction index of each propagate mode and the number of modes as function of AgNO<sub>3</sub> concentration. We observe that with the niobium phosphate glass and soda-lime glass is easier to obtain waveguides than the BK7 commercial glass. We thus report the main processes that happen in ion-exchange. We discussed this result in relation of low excess loss, high chemical durability, low polarization dependency, high uniformity of the output channels and finally low backreflection. Some results will be show in relation of the ion exchange semiconductor doped glasses.

(TELEBRAS, PADCT, FAPESP, FINEP, CNPq)

## ESTABILIDADE ESTRUTURAL DE DIODO LASER SINTONISÁVEL EM CAVIDADE EXTERNA

*Luiza M. R. Codá*

Departamento de Engenharia Elétrica, EESC-USP, 13.560-250, S. Carlos - SP

*Sergio Celaschi*

CPqD/TELEBRÁS, 13.088-061, Campinas - SP

*Evandro Conforti*

Faculdade de Engenharia Elétrica, UNICAMP, 13081-970 - Campinas-SP

*Palavras-Chave:* Laser sintonizável, cavidade externa, diodo laser, acoplamento óptico

Diodos Laser (DL) semicondutores sintonizáveis são fontes amplamente empregadas em sistemas ópticos de transmissão em múltiplos comprimentos de onda. De modo a se obter sintonia contínua em uma ampla faixa espectral, DL são montados em diferentes estruturas acopladas a uma cavidade externa responsável pela realimentação óptica espectralmente seletiva na camada ativa da estrutura do semicondutor. Por este processo são fabricados Lasers em Cavidade Externa (LCE) sintonizáveis operando em regime monomodo. Com o objetivo de evitar instabilidades na potência de saída e/ou sintonia, é necessário garantir altos níveis de realimentação e portanto preservar a estabilidade mecânica da cavidade externa relativa ao DL em toda sua faixa da sintonia. Esta sintonia é geralmente obtida pelo posicionamento de uma grade de difração. Neste trabalho é analisada a estabilidade estrutural de diodos laser em cavidade externa convencional e com dupla passagem do feixe pela grade. Nesta análise é modelada a dependência do acoplamento óptico entre o diodo e a cavidade externa em função da topologia das estruturas. Baseado neste estudo são discutidos os resultados experimentais previamente obtidos [ref. 1], enfatizando que a alta estabilidade óptica observada na estrutura com dupla passagem pode ser substancialmente aumentada.

[1] L. M.R. Codá, J.P. Van der Weid and E. Conforti, *Opt. Lett.*, 17, 1682 (1992).

## ALINHAMENTO EM SISTEMAS TOPOGRÁFICOS UTILIZANDO LASER

*Marcelo Silva Sthel*

Setor de Óptica Aplicada, Lab. Ciências Físicas, Univ. Estadual Norte Fluminense

*Rodolfo Moreira de Castro Júnior*

Lab. Topografia, Depto. Engenharia de. Produção, Univ. Federal do Espírito Santo

*Palavras - Chaves* : Alinhamento, Teodolito, Laser

O trabalho proposto é uma busca de aprimoramento de técnicas convencionais para ajuste de eixos constituidores (colimação, principal e secundário) de teodolitos e níveis de precisão, instrumentos imprescindíveis aos trabalhos de levantamento topográfico e geodésicos. Propomos a retificação dos referidos eixos através do uso de técnicas laboratoriais, onde utilizamos um método interferométrico a laser (He-Ne) para o alinhamento do sistema óptico da luneta, a partir do qual se pode identificar o eixo de colimação. Usamos também o fato da incidência do laser sobre o retículo da luneta gerar uma figura de difração, o que possibilita identificar os eixos principal e secundário de um teodolito. Figuras de interferência em forma de anéis concêntricos são obtidas através da interferência dos feixes lasers, que são refletidos pela faces das lentes. Para se estabelecer um alinhamento inicial é necessário que os anéis e a mancha refletida estejam concêntricas em relação orificio que atravessa o laser, existindo uma distribuição espacialmente uniforme de luz em torno deste ponto, pode-se acompanhar visualmente este alinhamento num anteparo. A figura de difração citada apresenta-se em forma de cruz, sendo similar a uma figura de difração de duas fendas retangulares cruzadas. Para completarmos o alinhamento é necessário centralizar no orificio do anteparo o ponto de cruzamento da figura de difração com o centro geométrico dos anéis, completando assim o alinhamento inicial. Podemos então definir o eixo de colimação da luneta e identificar o eixo secundário, que pela construção do teodolito em estudo é perpendicular ao eixo principal. O método pode ser aplicado em série com resultados precisos e rápidos, podendo ser testado através de uma inspeção visual, o mesmo é mais simples do que os métodos convencionais usados em topografia..

## CARACTERÍSTICAS ESPECTRAIS DE LASERS DE DUPLA SEÇÃO: COMPARAÇÃO ENTRE MODELAMENTO E RESULTADOS EXPERIMENTAIS

*Ildefonso Felix de Faria Jr, Alberto Paradisi, Walter J. Carvalho de Oliveira e Ederval Missio*  
CPqD - Telebrás - Cx.P. 1579 Campinas, SP - CEP 13088-061 (email: felix@cpqd.br)

*Palavras Chave*: Laser DFB, Laser multieletrodos, Laser sintonizável

Lasers de semicondutores multi-eletrodos são especialmente promissores para uso em comunicações ópticas e comutação fotônica devido as diversas funções que podem assumir, tais como: filtros ópticos sintonizáveis, emissores sintonizáveis, dispositivos bi-estáveis e conversores de comprimento de onda. Todas estas funções podem ser obtidas em lasers DFB de duas seções. Foram estudadas duas diferentes estruturas para lasers DFB de InGaAsP/InP de dupla seção, uma contendo rede de difração ao longo de toda a cavidade e outra com uma seção sem rede de difração. Os lasers têm dois segmentos de 300µm, perfazendo um total de 600µm. A separação entre eletrodos é feita através de um canal de 3-6µm de profundidade, obtendo-se isolamento elétrica de até 450Ω.

O laser com rede contínua teve um fator de acoplamento óptico entre o modo e a rede de difração de cerca de  $K=70\text{cm}^{-1}$  resultando num produto  $KL=4,2$ . O efeito do "hole burning", que provoca deformação no espectro de lasers com injeção uniforme, foi evitado ajustando-se adequadamente as correntes nos dois eletrodos. Assim obtivemos funcionamento monomodal com pureza espectral superior a 40dB.

O laser com rede interrompida apresenta característica de sintonia de comprimento de onda semelhante aos lasers DBR (Distributed Bragg Reflector). A seção sem rede de difração é responsável pelo ganho óptico e a seção contendo a rede propicia a sintonia modal. Para evitar competição modal entre as diferentes cavidades foi feita uma corrosão química seletiva no espelho traseiro. O resultado foi a obtenção de um laser sintonizável numa faixa de 5nm, correspondendo a oito modos.

Todos os resultados experimentais são comparados com simulação matemática apresentando excelente concordância. Obtivemos assim um progresso significativo no modelamento e na fabricação de lasers de dupla seção com grande pureza espectral e ampla sintonia modal.

## ESTUDO DAS CONDIÇÕES DE CORTE EM UMA FIBRA $W_2$

Humberto Filomeno da Silva, Claudia Adriana\*, Frederico Dias Nunes

Instituto de Física - USP de São Carlos, \* Depto. de Física - UFC

*Palavras-Chave:* fibra, corte, modos

Uma fibra ótica coaxial do tipo  $W_2$  [1], apresenta quatro camadas distintas cujos índices de refração que satisfazem à seguinte relação:  $n_1 > n_3 > n_4 > n_2$ , sendo  $n_1$  o índice de refração do núcleo,  $n_2$  o da barreira,  $n_3$  o do anel e  $n_4$  o da casca. Após Boucouvalas [2], este tipo de fibra começou a ser estudado e usado no desenvolvimento de dispositivos para comunicação ótica tais como filtros espectrais e acopladores. A descrição da propagação da luz nestes dispositivos, envolve principalmente o acoplamento dos dois modos de mais baixa ordem e mesma simetria axial ( $HE_{11}$  e  $HE_{12}$ ), sendo então importante determinar como a frequência de corte destes modos, muda em função dos vários parâmetros da fibra (seus quatro índices de refração e dimensões espaciais das camadas de índices de refração). Neste trabalho, a partir da solução numérica da equação transcendental que descreve a condição de corte, e uma análise assintótica da mesma, são obtidas as curvas de delimitação que separam a região onde o modo  $HE_{11}$  tem corte nulo daquela na qual ele é diferente de zero. Também são obtidas as curvas de corte mostrando a dependência da frequência de corte dos diferentes modos em função dos parâmetros da fibra. Ao contrário da fibra  $W_1$  (obtida da  $W_2$  fazendo  $n_4 < n_2$ ) [1], cujo modo fundamental sempre tem frequência de corte nula, nas fibras  $W_2$  o mesmo modo pode ter corte para frequências diferentes de zero.

[1] F. D. Nunes, C. A. F. de Melo, H. F. da Silva, 'Theoretical study of coaxial fibers', Applied Optics, 35, 388-399, January, 1996.

[2] Boucouvalas A. C., "Coaxial optical fiber coupling", J. Lightwave Technol., LT-3, 1151-1158, 1985.

## GERAÇÃO DE RADIAÇÃO AZUL SINTONIZÁVEL COM LASER DIODO

Germano Woehl Jr. #, Guilherme A. Garcia, Daniel Pereira e Artemio Scalabrin

Instituto de Física "Gleb Watagnin", UNICAMP

Departamento de Eletrônica Quântica

# Instituto de Estudos Avançados, CTA

Divisão de Atividades Eletromagnéticas

*Palavras-chave:* laser, cavidade, espectroscopia.

O uso de lasers semicondutores em espectroscopia é bastante interessante, especialmente quando se trata de aplicações que requerem fontes de radiação laser confiáveis de longo termo. Lasers diodo mono-modo, sintonizáveis, operando na região do infravermelho próximo, entre 750 e 850 nm, são comercialmente disponíveis. De uma maneira relativamente simples se obtém com esses lasers diodo largura de linha inferior a 1 MHz. A sintonia de um único laser diodo é possível num intervalo de até 20 nm por meio da variação de temperatura com um esquema experimental bastante simples. Pela geração de segundo harmônico num cristal não linear de niobato de potássio ( $KNbO_3$ ) é possível dobrar a frequência do laser diodo obtendo-se assim uma fonte sintonizável de radiação na região azul do espectro. Usando um laser diodo Mitsubishi ML 5784F-01 operando em 846 nm com 10 mW de potência disponível obteve-se  $\approx 5 \mu W$  em 423 nm (eficiência de  $\approx 2\%$ ) utilizando um cristal de  $KNbO_3$  com dimensões:  $3 \times 3 \times 10$  mm de comprimento, montado numa cavidade passiva. O "phase matching" (tipo I) do cristal é feito por temperatura. A cavidade passiva desenvolvida para amplificação da potência do laser diodo é do tipo anel (com 2 espelhos planos e 2 espelhos esféricos com  $r=10$  cm). Obteve-se um fator de amplificação de 50 vezes com esta cavidade passiva incluindo o cristal. Um servo sistema, baseado na análise da polarização da feixe do laser de diodo que é refletido no espelho de acoplamento da cavidade, faz o travamento do modo da cavidade passiva com o modo do laser diodo. Foi obtida com baixo custo uma eficiente fonte de radiação laser na região azul do espectro, com boa confiabilidade e de fácil operação para aplicações em espectroscopia de alta resolução que não exigem potência elevadas.

(FAPESP, FINEP, CNPq-RHAE)

## ASSIGNMENTS OF FIR LASER LINES FROM OPTICALLY PUMPED $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$

*J.C.S. Moraes*

Departamento de Física e Química da FEIS - UNESP

*G. Carelli, A. Moretti, G. Moruzzi, F. Strumia*

Dipartimento di Fisica dell'Università di Pisa - Italia

**Key Words:**  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ ; Far-Infrared (FIR); FIR laser lines; Assignment

The assignment of the FIR laser transition of the various methanol isotopomers is of great interest both for a better exploitation of the optically pumped methanol lasers (we recall that optically pumped molecular lasers are practically the only available sources of coherent radiation in the FIR spectral region), and for a better understanding of the physics of the methanol molecule. We have revisited the assignments of the far-infrared laser lines emitted by  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  by comparing the laser systems to a high resolution Fourier Transform absorption spectrum of  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ . The absorption spectrum was analysed by means of the "RITZ" program, which calculates the energy level values directly from the Rydberg-Ritz combination principle. We report new assignments for 11 FIR laser transitions, 17 frequency predictions for new possible laser lines, and we confirm 11 previous assignments.

(CNPq, FAPESP)

## VIDROS ÓXIDOS CONTENDO METAIS PESADOS E FLUORETOS CRISTALINOS PARA APLICAÇÕES MAGNETOÓPTICAS

*Carmen Beatriz Pedroso, Egberto Munin, Victor Ciro Solano Reynoso,  
Norberto Aranha, Antonio Balbin Villaverde e Luiz Carlos Barbosa*

IFGW - UNICAMP

**Palavras-Chave:** *Efeito Faraday - Magnetoóptica*

Neste trabalho são apresentados os resultados do estudo da rotação magnetoóptica para uma família de cinco cristais fluoretos ( $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$  e  $\text{PbF}_2$ ), para um sistema vítreo quaternário contendo  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{PbO}$ ,  $\text{GeO}_2$  e  $\text{B}_2\text{O}_3$  (família BPGB) e ainda, para um sistema vítreo ternário contendo  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CdO}$  e  $\text{GeO}_2$  (família BCG). As medidas das constantes de Verdet destes materiais foram feitas utilizando-se um laser de He-Ne operando em 632,8 nm, 6 linhas de um laser de argônio e campos magnéticos pulsados entre 50 KG e 70 KG produzidos por descarga capacitiva em um solenóide. Os cristais de fluoretos foram crescidos pela Harshaw Chemical. Todos, com exceção do fluoreto de magnésio que é tetragonal, são de estrutura cúbica. A partir de nossas medidas observamos que a rotação magnetoóptica para o  $\text{PbF}_2$  é pelo menos cinco vezes maior que para os demais fluoretos. Devido a sua elevada rotação magnetoóptica, combinada com sua excelente transparência na região de 300 - 400 nm, este cristal se constitui em excelente alternativa para a construção de isoladores no ultra violeta próximo. Os vidros das famílias BPGB e BCG foram preparados pelo laboratório de materiais vítreos do Departamento de Eletrônica Quântica do IFGW. As composições preparadas nos permitiram avaliar a contribuição dos metais pesados Bi, Cd e Pb para a rotação magnetoóptica dos vidros. As concentrações destes elementos pesados foram variadas de maneira a cobrir toda a faixa de formação de vidros, tanto para o sistema quaternário como para o ternário. A rotação magnetoóptica foi estudada em função da concentração daqueles metais pesados. Obtivemos composições vítreas com constantes magnetoópticas de até 0.162 min / G cm.

FAPESP, CNPq

Large Offset FIR Laser Lines Generation from the  
C-O Stretching Q-Branch of  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$

R.C.Viscosini, E.M.Telles, A.Scalabrin, D.Pereira  
Instituto de Física-UNICAMP

Key words: Laser,  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$ , Optical pumping

The C-O stretching Q-branch of the methanol isotopomers are very dense spectral regions, presenting hundreds of strong infrared transitions, several of what suitable to generate intense FIR laser lines when optically pumped. For the  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$  sample the 10R(12), up to the 10R(22)  $\text{CO}_2$  laser lines are in superposition with this spectral region. By using a waveguide  $\text{CO}_2$  laser of high tunability (290MHz), we could pump several infrared  $^{13}\text{CD}_3\text{OD}$  transitions of large offset. The FIR cavity itself was used as a photoacoustic cell to identify the stronger absorption transitions. As a consequence 10 new FIR laser lines, ranging from  $109\mu\text{m}$  to  $472\mu\text{m}$  were observed. For all lines, we measured the wavelength, the relative polarization, the optimum working pressure and the precise offset relative to the  $\text{CO}_2$  laser line frequency centre through the Transferred Lamb-Dip technique. In this way we increase the number of FIR laser lines generated from transitions appertaining to the C-O Stretching Q-branch from 8 lines previously reported to 18 lines.

Work supported by FAPESP, CNPq, and FAEP/UNICAMP.

**LASER SEMICONDUTOR EM CONFIGURAÇÃO LITTMAN**

Guilherme de Andrade Garcia, Daniel Pereira, Artemio Scalabrin  
Dep. de Eletrônica Quântica - Inst. de Física "Gleb Wataghin - UNICAMP

*Palavras chave* : laser, semicondutor, espectroscopia.

Lasers semicondutores mostraram ser fontes de radiação ótica de boa pureza espectral, com aplicações em espectroscopia atômica e metrologia. Seu uso cresce continuamente devido ao baixo custo, facilidade de aquisição e operação, empregando também instrumentação acessória relativamente barata. Podemos melhorar suas características de operação se empregarmos elementos externos, como grades de difração e espelhos, otimizando características como largura de linha e faixa de sintonia. A configuração Littman [1], aplicada a lasers semicondutores por Harvey-Myatt [2], é formada pelo diodo laser, uma grade de difração em incidência rasante e um espelho. A reflexão especular da grade é o feixe de saída, e a reflexão de ordem  $m = -1$  é interceptada pelo espelho e enviada novamente para a grade e desta ao laser. As vantagens são : uso de diodos laser em encapsulamentos comerciais, estabilidade do feixe de saída, alta seletividade espectral da grade de difração pela incidência rasante e dupla passagem. Empregando um laser semicondutor de 15 mW @ 50 mA e  $\lambda = 855\text{nm}$  obtivemos potência útil de 4 mW, sintonia descontínua de  $\pm 5\text{ nm}$  e contínua de 10 GHz atuando simultaneamente sobre a rotação e translação do espelho com elementos piezoelétricos. A largura de linha medida revelou-se menor que 8 MHz, limitada pela resolução do interferômetro Fabry-Perot de 2 GHz e finesse 250.

[1] M. Littman, H. Metcalf, Appl. Opt., 17, 2224, 1978.

[2] K. Harvey, C. Myatt, Optics Letters, 16, 910, 1991.

CNPq, FAPESP.

## AMPLIFICAÇÃO POR CURVATURA DE ESPALHAMENTO RAMAN ESTIMULADO EM FIBRAS DE NÚCLEO LÍQUIDO

Marcelo Beninca, Helena Libardi e Ricardo R.B. Correia\*

Instituto de Física - UFRGS

\*atual. Departamento de Física -UFPE

**Palavras Chave:** fibras de núcleo líquido, Raman estimulado, curvatura

Fibras multimodo de núcleo líquido vem sendo sistematicamente estudadas como dutos ópticos de lasers UV de alta potência [1]. O Espalhamento Raman Estimulado (ERE) observado nestas fibras tem sido analisado como fonte de múltiplos comprimentos de ondas para diversas aplicações [2,3]. É reportado aqui que, ao otimizar as condições de geração de ERE nestas fibras, foi observada amplificação devida à mudança do raio de curvatura. Este fenômeno foi observado em um capilar de sílica fundida ( $L=50\text{cm}$ ,  $D_{\text{int}}=50\mu\text{m}$  e  $n=1,46$ ) preenchido com álcool benzílico ( $n=1,54$ ), no qual foi acoplado um feixe pulsado do 2º harmônico de um laser de Nd:YAG (532 nm). As intensidades das diversas ordens de ERE foram observadas em função da curvatura da fibra. Ao invés de introduzir perdas excessivas, o enrolamento progressivo foi capaz de promover o aparecimento de várias ordens de ERE, ausentes no sinal em que o capilar era mantido alongado. Nestas fibras multimodo, o crescimento da densidade de potência próximo à interface sólido/líquido é bastante elevada nas condições em que é curvada [1]. Este fato aponta para um processo que desenvolve-se preferencialmente junto à superfície interna do capilar. Neste trabalho procura-se evidenciar que o efeito de Espalhamento Raman Amplificado em Superfície representa um dos mais prováveis mecanismos, devido à quebra de simetria provocada na interface.

[1] Haisch M., Scobro C. & Hering P. Laser Optoelektron.v.23 (1991) 44.

[2] Mingxin Qiu et al, Appl. Opt. 30, 3852 (1991)

[3] Guang S. He et al, Appl. Opt. 34, 444 (1995)

( Apoio Financeiro: FAPERGS, CNPq, PADCT/FINEP)

## PROPRIEDADES ESPECTRAIS E TEMPORAIS DOS PROCESSOS DE RELAXAÇÃO CRUZADA ENTRE ÍONS DE Tm NO YLF

*Luiz Vicente Gomes Tarelho, Laércio Gomes, Izilda Márcia Ranieri e Spero Penha Morato.*

Divisão de Materiais Optoeletrônicos -Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/ SP

**Palavras Chave:** luminescência, supressão, relaxação cruzada.

A investigação do processo de relaxação cruzada ( ${}^3\text{H}_4, {}^3\text{F}_4$ )  $\rightarrow$  ( ${}^3\text{H}_6, {}^3\text{F}_4$ ) é importante na análise de lasers de íons de terras-raras operantes no infravermelho que utilizam o íon de Túlio como ativador ou como sensibilizador.

No caso de um bombeamento com diodo em 796 nm ressonante com a absorção  ${}^3\text{H}_6 \rightarrow {}^3\text{H}_4$ , o processo de relaxação cruzada popula eficientemente o nível  ${}^3\text{F}_4$  ( nível laser superior para ação laser em 1,8  $\mu\text{m}$  ou nível doador ), sendo responsável pela duplicação da população deste nível .

Quando o bombeamento é realizado por lâmpada, um processo de relaxação cruzada que também assume importância é o processo ( ${}^1\text{G}_4, {}^3\text{H}_5$ )  $\rightarrow$  ( ${}^3\text{H}_6, {}^3\text{H}_4$ ) que popula eficientemente o nível  ${}^3\text{H}_4$ , que será depopulado por sua vez pelo processo ( ${}^3\text{H}_4, {}^3\text{F}_4$ )  $\rightarrow$  ( ${}^3\text{H}_6, {}^3\text{F}_4$ ), mais uma vez favorecendo a população do nível  ${}^3\text{F}_4$ .

Foram utilizadas técnicas de absorção e emissão convencionais e um sistema de emissão resolvido no tempo para caracterizar os processos que ocorrem no sistema. Os espectros de emissão estudados apresentam uma supressão de luminescência ( quenching ) nas emissões do visível em detrimento das emissões do infravermelho, dando indícios de que ocorrem processos de relaxação cruzada entre os níveis estudados. As medidas do tempo de vida dos níveis  ${}^3\text{H}_4$  e  ${}^3\text{F}_4$ , permitem determinar as probabilidades de relaxação cruzada para ambos processos.

Analisando o comportamento do tempo de vida luminescente em função da concentração do íon de Tm, pode-se determinar as taxas de probabilidade de relaxação cruzada e o mecanismo eletromagnético responsável pela interação, ou seja, um processo multipolar magnético ou elétrico.

( FAPESP, CNPq, FINEP )

## POLARIZAÇÃO EM REDES FOTORREFRATIVAS E DE ABSORÇÃO

*P.A.M. dos Santos e G. Nader*  
Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

*Palavras-Chave:* polarização, fotorrefrativo, absorção

Neste trabalho apresentamos uma evidência experimental da influência da polarização dos feixes de luz na escrita de hologramas em cristais  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  (BTO) e a interação das redes fotorrefrativas e de absorção durante o decaimento, produzindo ou não um aumento na intensidade de luz difratada pelas redes senoidais. Todos os resultados experimentais são descritos do ponto de vista da difração anisotrópica, utilizando apenas o mecanismo de difusão, iluminando a face de entrada (110) com um laser He-Ne, e o vetor da rede  $k_x$  perpendicular ao eixo  $\langle 001 \rangle$ .

O primeiro resultado obtido refere-se ao acoplamento das amplitudes da rede fotorrefrativa de buraco e da rede de absorção durante o decaimento. Isto é obtido utilizando-se um polarizador na entrada do cristal, compensando a atividade óptica, de modo que a polarização dos feixes de escrita e do feixe de prova seja vertical no centro da amostra. Neste caso, há o aumento de intensidade no decaimento das redes que ocorre em três estágios distintos.

O segundo resultado obtido refere-se à não ocorrência do acoplamento das amplitudes das redes no feixe difratado durante o decaimento. Neste caso, utilizamos a polarização dos feixes vertical na face (110) do cristal. Assim sendo, obtivemos um decaimento contínuo em apenas dois estágios. Esta mudança na polarização dos feixes de escrita é responsável pela ocorrência ou não do acoplamento das redes fotorrefrativa de buracos e de absorção através da diferença de amplitude entre estas redes que possuem aproximadamente a mesma constante de tempo no decaimento.

As observações foram feitas em redes ditas semipermanentes, pois a amostra é submetida a longos tempos de exposição. Neste caso, há uma forte dependência na eficiência de difração da polarização dos feixes de escrita. Ao contrário, em hologramas escritos com tempo de exposição curto, a eficiência de difração não apresenta dependência da polarização destes feixes.

## PROCESSOS DE FABRICAÇÃO DE GUIAS DE ONDA CANAL EM SUBSTRATOS DE SILÍCIO

*M. B. Costa e Silva, J. F. Martins-Filho, e E. F. da Silva, Jr.,*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
Cidade Universitária, Recife PE, 50670-910, Brasil.

*Palavras-Chave:* guias de onda, optoeletrônica, silício

Dispositivos optoeletrônicos são de grande importância para o avanço tecnológico na área de telecomunicações devido às suas aplicações em circuitos de comutação óptica, multiplexação, sensores, etc. Em larga escala, semicondutores do grupo III-V e vidros dopados tem sido utilizados. Entretanto, devido à sua importância nas tecnologias avançadas é de grande interesse o desenvolvimento da optoeletrônica em substratos de silício. Isto deve-se ao avançado estágio das etapas e técnicas envolvidas nos processos de fabricação e possibilidade de uso de outras características físicas intrínsecas aos materiais.

Neste trabalho, apresentamos processos de fabricação de guias de onda canal em substratos de silício com estruturas do tipo  $\text{SiO}_2/\text{Si}_x\text{N}_y/\text{SiO}_2/\text{Si}$ . Os guias têm dimensões  $\sim 2\mu\text{m}$  e os filmes finos foram formados utilizando-se técnicas de oxidação térmica e sputtering reativo. Para garantir a qualidade dos guias foi desenvolvido um processo de crescimento de  $\text{SiO}_2$  térmico e a corrosão do  $\text{Si}_x\text{N}_y$  foi realizada num sistema de refluxo fechado a  $200^\circ\text{C}$ . Os guias de onda foram caracterizados opticamente pelo método do prisma e por elipsometria. Os valores de índice de refração e espessuras dos filmes obtidos através destes métodos estão de acordo com valores oriundos de simulações. Das relações para as espessuras relativas dos filmes de  $\text{SiO}_2$  e  $\text{Si}_x\text{N}_y$  podemos prever o número de modos guiados e as perdas nos guias são estimadas em menos de  $0.5\text{ dB/cm}$ . O desenvolvimento desses processos para guias de onda usando técnicas de fabricação associadas a tecnologias do silício abre inúmeras possibilidades para o desenvolvimento de estruturas de dispositivos e circuitos optoeletrônicos à base de substratos de silício.

(CNPq, FINEP)

## CARACTERIZAÇÃO DE FIBRA ÓPTICA PARA ACOPLAMENTO DE ALTAS POTÊNCIAS DE RADIAÇÃO VISÍVEL

*Jorge L. S. Ferreira, Marcelo G. Destro, Benedito Christ,  
Nicolau A. S. Rodrigues e Carlos Schwab*

Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP

*Palavras-Chave:* fibra óptica, transporte de potência, radiação visível

Nos últimos anos ocorreu uma rápida evolução e diversificação do uso de sistemas de fibras ópticas. Sistemas de comunicação a longa distância, sensores, divisores de feixes e dispositivos de entrega de potência têm sido desenvolvidos com o uso de fibras ópticas. Os sistemas de entrega de potência que utilizam fibras ópticas estão substituindo os que utilizam espelhos, devido ao fato que os primeiros possuem maior flexibilidade, estabilidade e facilidade de alinhamento, comparado aos últimos. Produtos comerciais já se encontram disponíveis para aplicações médicas e de processamento de materiais. Entretanto, poucos dispositivos a fibra para lasers pulsados de alta potência (alguns MW/pulso) estão disponíveis no mercado, especialmente na região visível do espectro. Iniciamos trabalhos no sentido de obter um dispositivo de entrega de potência para lasers de vapor de cobre e de corante, e também um dispositivo de combinação de feixes de lasers de corante. Na prática, a direção e a divergência dos feixes destes lasers mudam com o tempo. Estas características devem ser bem determinadas para o desenvolvimento de tais dispositivos, levando em consideração limitações mecânicas e operacionais. Neste trabalho apresentamos resultados preliminares da caracterização de uma fibra óptica multimodo com grande diâmetro de núcleo (1,0 mm) obtidos usando-se lasers de HeNe e lasers de vapor de cobre. O objetivo final desta caracterização é a utilização da fibra em um laser de vapor de cobre para aplicações médicas e em dispositivos de bombeamento óptico para aplicações de lasers em separação de isótopos.

*(IEAv/CTA e PADCT/CNPq)*

## ESTUDO DA PROPAGAÇÃO DE PULSOS CURTOS EM FIBRAS ÓPTICAS NÃO-HOMOGÊNEAS

*Carlos Alberto Carneiro Feitosa, Antônio Sérgio Bezerra Sombra*

Departamento de Física, Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará

*Palavras-chave:* pulsos, fibra, não-homogênea

Recentemente foram confeccionadas fibras ópticas não-homogêneas que apresentam uma dispersão que diminui gradativamente, até um certo valor limite, em função da coordenada axial. Essas fibras ópticas são úteis na compressão de pulsos e podem ser usadas em conjunto com fibras ópticas dopadas com érbio, como amplificadores. Em geral os parâmetros de dispersão e de não-linearidade podem apresentar alguma dependência com a posição na fibra óptica, além das flutuações que esses parâmetros adquirem durante o processo de fabricação. Quando essa dependência ocorre somente na coordenada axial a fibra adquire uma não-homogeneidade axial. Neste trabalho fazemos um estudo numérico e analítico da propagação e da interação de pulsos ópticos curtos em fibras ópticas com não-homogeneidades axiais. Analisamos dois modelos de não-homogeneidade na dispersão. No primeiro modelo a dispersão diminui ou aumenta gradativamente ao longo da coordenada axial. No segundo modelo a dispersão tem um comportamento periódico. A propagação de pulsos ópticos curtos em fibras ópticas mono-modo é modelada a partir da equação não-linear de Schrödinger, incluindo os efeitos de perda, dispersão de velocidade de grupo e de auto-modulação de fase. O estudo numérico é feito por meio de um método pseudo-espectral e a modelagem analítica é feita por meio de métodos variacionais. Estudamos numericamente a estabilidade dos pulsos, efetuando colisões entre os mesmos, com o objetivo de verificar a formação de pulsos do tipo *soliton*. Estudamos a propagação livre de um único pulso e a interação entre pares de pulsos, com o objetivo de verificar a possibilidade de controlarmos a dinâmica das interações com uma escolha conveniente da dependência dos parâmetros da fibra com a posição ao longo de seu eixo.

## HETERODINAGEM DE FREQUÊNCIAS NO TERAHERTZ

*Edjar Martins Telles, João Carlos Silos de Moraes<sup>#</sup>, Artemio Scalabrin, Daniel Pereira*  
Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP, Campinas, 13.083/970, S.P., Brasil

<sup>#</sup>Departamento de Física e Química, UNESP, Ilha Solteira, 15.385/000, S.P., Brazil

*Palavras-Chaves:* Laser, Heterodinagem, TeraHertz

Neste trabalho apresentamos medidas diretas de frequências de linhas laser na região do infravermelho longínquo (IVL = 1-10 THz) através da técnica heterodina. Nesta técnica, linhas lasers de frequências próximas, uma adotada como referência e outra como incógnita, são misturadas num diodo de contato de ponta do tipo metal-isolante-metal (MIM). Este diodo é capaz de gerar a diferença das frequências misturadas (batimento) que após ser amplificado é diretamente medida num analisador de espectro comercial.

Utilizamos lasers de CO<sub>2</sub> como fonte de excitação óptica, ressonadores do tipo Fabry Perot como laser no IVL e moléculas do tipo metanol (CH<sub>3</sub>OH) como meio ativo. O diodo MIM, misturador e gerador de harmônicos, é formado por um filamento de tungstênio, de comprimento entre 3-6 mm e diâmetro entre 25-50 µm, em contato pontual com a estreita camada de óxido formada naturalmente na base polida de um cilindro de níquel. Para o adequado contato pontual é feito um ataque químico eletrolítico (*etching*) com uma solução de NaOH na extremidade livre do tungstênio até atingir raio de curvatura da ordem de centenas de nanômetros. A impedância da junção W-NiO é ajustada mecânicamente através de um parafuso micrométrico adequadamente acoplado a um suporte e monitorada entre 300-600 Ω com auxílio de um adequado circuito eletrônico.

Neste arranjo, as linhas lasers IVL geradas são cuidadosamente sobrepostas num divisor de feixes (*beam splitter*) de Silício e dirigidas para um espelho parabólico de cobre. O diodo MIM é posicionado adequadamente no foco deste espelho através da maximização do sinal retificado por ele gerado.

As frequências medidas estão na região de 800 GHz a 1600 GHz com reprodutibilidade da ordem de partes em 10<sup>7</sup>. Estes resultados não só contribuem para o aumento do número de padrões secundários de frequência na região espectral compreendida entre as microondas e o visível mas também auxiliam na análise espectroscópica do meio ativo. De fato, a identificação dos níveis envolvidos em ciclos lasers são propostas ou verificadas diretamente através da utilização das frequências medidas.

(Fundação Banco do Brasil, FAPESP, CNPq-RHAE, FAEP-UNICAMP)

## CARACTERIZAÇÃO DOS PROCESSOS DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA NO CRISTAL Nd:Ho:YLF PARA AÇÃO LASER EM 3 µm.

*Fábio Henrique Jagosich, Luiz Vicente Gomes Tarelho, Laércio Gomes, Izilda Márcia Ranieri,*  
Divisão de Materiais Optoeletrônicos - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/ SP

*Palavras chave:* transferência de energia, cristais fluoretos, terras-raras

Existe um grande interesse no desenvolvimento de lasers de íons de terras-raras operantes no infravermelho devido às possibilidades de aplicações médicas e odontológicas. A região de 3 µm é de interesse devido à forte interação da emissão laser com tecidos biológicos.

Um laser de Ho em 2,9 µm é um sistema de quatro níveis cujo nível laser inferior possui um tempo de vida maior que o tempo de vida do nível laser superior. A utilização do nível <sup>4</sup>I<sub>3/2</sub> do Nd como escoadouro de energia diminui o tempo de vida do nível laser inferior (<sup>5</sup>I<sub>7</sub> do Ho). Além disso o nível <sup>4</sup>F<sub>3/2</sub> do Nd funciona como sensibilizador, transferindo energia para o nível <sup>5</sup>I<sub>5</sub> do Ho.

A caracterização da transferência (<sup>4</sup>F<sub>3/2</sub> → <sup>5</sup>I<sub>5</sub>) foi realizada utilizando-se o método de Förster-Dexter que consiste na determinação do raio crítico de interação a partir dos espectros de absorção e emissão dos íons envolvidos. A partir do raio crítico de interação pode-se obter a probabilidade de transferência de energia.

Analisando o processo de desexcitação radiativa do nível (<sup>4</sup>F<sub>3/2</sub> do Nd) em comparação com a probabilidade de transferência de energia observa-se que o processo de transferência para o Ho é predominante, sendo este processo o responsável pela população do nível laser superior.

( FAPESP, CNPq, FINEP )

## COMBINAÇÃO DE ALTO SINAL DE ENTRADA E POTÊNCIAS DE BOMBEAMENTO MODESTAS NO PROJETO DE AFDEs DE POTÊNCIA

*M. J. Pontes, R. F. Souza*

Departamento de Microonda e Óptica - Faculdade de Engenharia Elétrica

*H. L. Fragnito*

Departamento de Eletrônica Quântica - Instituto de Física,

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP / Campinas - SP

13083-970, Cx. P. 6101, Fax: (0192) 39 1395

*Palavras-Chave:* amplificadores, fibra, comunicações

Apresentamos os resultados referentes à montagem e modelamento de um amplificador a fibra dopada com érbio em dois estágios, com o objetivo de maximizar a potência de sinal amplificado, para utilização como amplificador de potência. A estratégia é combinar alta potência de sinal de entrada e potências de bombeamento modestas disponíveis. O trabalho teórico envolveu a simulação do amplificador em dois estágios de fibra, a partir de modelamento analítico. Determinou-se os comprimentos ótimos de fibra para a maximização da potência de sinal de saída, respeitando-se as potências de bombeamento e de sinal disponíveis no laboratório. A partir disto, realizaram-se os experimentos. Escolheu-se uma FDE codopada com GeO<sub>2</sub>, por esta fibra apresentar um pico de emissão mais intenso em 1535 nm, que coincide com o comprimento de onda de sinal utilizado. Isto maximiza a potência de sinal de saída. A FDE foi bombeada por lasers de potência moderadas, em 1480 nm. O bombeamento foi co-propagante com o sinal, pois as estimativas para potências de sinal de saída, a partir da simulação, no caso contra-propagante foram somente 0,5 dB maiores que para o caso co-propagante, enquanto que a figura de ruído foi três vezes superior. Embora este não fosse um parâmetro de otimização deste amplificador, optou-se pelo esquema co-propagante com a finalidade de se manter a figura de ruído em um nível aceitável. Obteve-se potências de sinal de saída relativamente altas, da ordem de +5 dBm. Pode-se chegar a uma configuração otimizada para o amplificador e, comparando-se os resultados para pequeno e alto sinal de entrada, pode-se observar a maior compressão da emissão espontânea amplificada para alto sinal de entrada.

LINHAS LASER NO INFRAVERMELHO LONGÍNQUO NA FAIXA DE 3 Å 11 THz

*E.C.C. Vasconcellos, S.C. Zerbetto*

IFGW - UNICAMP

*L.R. Zink, K.M. Evenson*

NIST - Boulder, CO - USA

*Palavras-chave:* metanol, lasers IVL, frequências

No presente trabalho, foram descobertas importantes linhas laser no infravermelho longínquo (IVL) a partir do bombeamento óptico com lasers de CO<sub>2</sub>. Diversos meios ativos, como o metanol e a hidrazina, foram investigados utilizando novas frequências de bombeamento disponíveis e uma nova cavidade ressonante no IVL com alto ganho para comprimentos de onda menores que 150 µm. Nestas condições, um número significativo de linhas foram observadas na faixa de frequências entre 3 e 11 THz. Também obtivemos sucesso na identificação das transições laser nos meios ativos CH<sub>2</sub>OH e <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH.

Apoio financeiro: CNPq, FAEP.

## ANÁLISE DE MODULADORES ELETRO-ÓPTICOS À ÓPTICA INTEGRADA

*Ribeiro, J.A.J.*

INATEL - Instituto Nacional de Telecomunicações - Santa Rita do Sapucaí - MG

*Kitano, C., Monteiro, E.C., Oliveira, J.E.B.*

ITA - Instituto Tecnológico de Aeronáutica - CTA - SJC- SP

**Palavras-Chave:** óptica integrada, modulador óptico, efeito eletro-óptico

A investigação de moduladores eletro-ópticos à óptica integrada tem recebido grande atenção em face da elevada largura de faixa de frequências que pode ser obtida com esses dispositivos, utilizando-se baixo nível de sinal de modulação. A obtenção deste desempenho depende do material eletro-óptico utilizado e das características do sinal modulador, entre outros parâmetros. Nesses moduladores o sinal óptico a ser modulado propaga-se ao longo de um guia óptico do tipo canal, fabricado num substrato eletro-óptico. A modulação deste sinal é realizada através da ação de uma distribuição de campo elétrico, via efeito eletro-óptico, a qual é controlada através de eletrodos planares convenientemente alimentados por um sinal elétrico de modulação. A análise do modulador eletro-óptico requer a determinação da sua resposta em frequência em termos dos seguintes parâmetros: diferenças entre os índices de refração efetivos do sinal modulador e do sinal óptico, perda de potência por propagação do sinal modulador e descasamento de impedância nos acessos dos eletrodos. Várias técnicas de análise já foram publicadas por diferentes autores, no entanto, as formulações apresentadas normalmente possuem simplificações que não permitem levar em consideração, de forma simultânea, os efeitos acima mencionados. Neste trabalho apresenta-se uma formulação unificada que permite analisar o comportamento dinâmico de um modulador eletro-óptico, levando-se em consideração os mecanismos que limitam a sua resposta em frequência. Os resultados numéricos da análise desenvolvida foram obtidos utilizando-se moduladores em substrato de  $\text{LiNbO}_3$  e eletrodos planares com geometria e espaçamentos arbitrários. Várias configurações de moduladores foram analisadas e suas respostas em frequência e os correspondentes níveis de sinais requeridos foram determinados. A formulação generalizada desenvolvida permite obter vários resultados particulares, determinados por diferentes autores.

## O PERFIL DE TEMPERATURA DA REGIÃO DA MESOPAUSA OBTIDO COM RADAR DE LASER

Maria Paulete Pereira Martins Jorge \*Barclay Robert Clemesha, Paulo Prado Batista, Hisao Takahashi, Delano Gobbi

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Departamento de Aeronomia, Laboratório Laser

**Palavras-Chaves:** radar de laser, temperatura mesosférica, sensoriamento remoto

Este trabalho consiste na obtenção do perfil de temperatura atmosférica entre 80 e 100 Km de altura, região da mesopausa. Ele baseia-se no desenvolvimento e aprimoramento de uma técnica experimental simples que permite determinar a temperatura da atmosfera utilizando um radar de laser e as propriedades físicas do sódio mesosférico.

A técnica utiliza o radar sintonizado na linha  $D_2$  do sódio (5890 Å) com um interferômetro Fabry-Perot acoplado à saída do laser. O Fabry-Perot possui um "free-spectral-range" de 0,0198 Å, cujo valor é o mesmo da separação da estrutura hiperfina da linha  $D_2$ . Um controlador de temperatura permite variar a temperatura do Fabry-Perot e realizar uma varredura em comprimento de onda na estrutura hiperfina do sódio.

A temperatura do sódio, ou da atmosfera, uma vez que estão em equilíbrio termodinâmico, é inferida da convolução entre o perfil do laser e o perfil de emissão ressonante do sódio durante a varredura em comprimento de onda.

Os perfis de temperatura foram obtidos no período de maio à agosto de 1995 e para as mesmas noites são comparados com a temperatura rotacional do OH e do  $\text{O}_2$  medidas a partir da luminescência natural com fotômetro de solo.

A concordância entre os resultados é boa e sugere que a camada de OH encontra-se por volta de 85 Km e a de  $\text{O}_2$  em aproximadamente em 90 Km de altura.

Também é discutida a junção entre o perfil obtido com radar de laser na região da mesopausa com aquele obtido, também com radar de laser, entre 30 e 70 Km de altura com base no espalhamento Rayleigh das moléculas da atmosfera.

(\* Bolsista de doutorado CNPq)

## ESTUDO DA SEGREGAÇÃO DE CÉLULAS EMBRIONÁRIAS

*José Carlos M. Mombach (1) e James A. Glazier (2)*  
(1) UFRGS - Brazil (2) University of Notre Dame - USA

*Palavras-chave:* morfogênese, biofísica do desenvolvimento, segregação celular

Quando células obtidas de diferentes tecidos de um embrião são dissociadas e misturadas num meio de cultura para reagregar, elas segregam gerando domínios do mesmo tipo celular no agregado. Em algumas espécies de animais simples como a *Hydra* até mesmo um indivíduo adulto pode regenerar de uma mistura das suas células originais. Em organismos mais complexos a regeneração total não ocorre, contudo alguns órgãos, após serem dissociados em células e estas reagregadas, têm a capacidade de gerar estruturas muito similares às originais. A teoria termodinâmica da adesão celular diferenciada foi proposta para explicar este processo biológico dado a sua semelhança com a separação de misturas de líquidos imiscíveis. A teoria propõe que a intensidade de adesão entre as células depende dos tipos celulares envolvidos e o sistema como um todo se auto-organiza no padrão que minimiza a energia total de adesão no sistema. Neste trabalho apresentamos um estudo experimental e de simulações da segregação de dois tipos de células obtidas de embriões de pintos e do movimento individual das células dentro dos agregados. Encontramos que a flutuação randômica das membranas celulares que corresponde ao mecanismo locomotor celular tem um papel análogo ao da temperatura em líquidos simples: um agregado composto de dois tipos celulares segrega parcialmente se as flutuações são inibidas pela adição de um fármaco específico ao meio de cultura. No entanto, a segregação pode ser obtida quando a droga é removida do meio. O movimento celular individual dentro dos agregados é alcatório na ausência de gradientes químicos ou adesivos; o espectro de potência da posição em função do tempo corresponde ao de um movimento browniano e a velocidade é descorrelacionada temporalmente. Também medimos a distribuição de velocidades das células que se assemelha à de Maxwell. Nossos resultados verificam a hipótese de que aglomerados de células embrionárias têm comportamento líquido.

(CNPq, NSF)

## PLASMA DESORPTION MASS SPECTROMETRY OF PHOSPHOLIPIDS AND CHOLESTEROL

*Cassia R. Ponciano, Cláudia S. C. de Castro, F. E. Ávalos Cascante,  
Sônia R. W. Louro, Enio F. da Silveira*

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - RJ

*Palavras-Chave:* PDMS, lipids

Plasma Desorption Mass Spectrometry (PDMS) uses fragments emitted from the spontaneous fission of  $^{252}_{96}\text{Cf}$  to desorb and ionize large and nonvolatile molecules for mass analysis. The impact of fission fragments induces fragmentation of the sample molecules, but intact molecules and even dimmers and trimmers are also desorbed during the process. Analysis of the fragmentation pattern is useful to elucidate the structure of large molecules. Phospholipids and cholesterol are important constituents of biological membranes. Their relative abundance characterizes the various types of membranes and influences membrane function. In this work, we report on PDMS spectra of cholesterol and of different classes of phospholipids obtained in the time of flight PD mass spectrometer constructed in our laboratory. The following classes of phospholipids were used: phosphatidylcholine (dimyristoyl, dipalmitoyl, and egg lecithin), phosphatidylethanolamine (dimyristoyl), and phosphatidylserine. Fragmentation patterns from both positive and negative ion spectra were analyzed. Peaks of intact molecules and dimmers were identified in all the positive ion spectra of phospholipids. Cholesterol presented also the peak of co-desorbed trimmers. In the low molecular weight region several characteristic peaks assigned to fragments of the phospholipid polar headgroups are present. The relative integrated intensities of these peaks are reproducible under the same experimental conditions, and can be used to estimate the relative amounts of phospholipid classes in a membrane. In negative ion spectra the peaks of intact fatty acid chains from phospholipids are present, and can be used to identify the distribution of lipid chain lengths in a membrane. Cholesterol presents a characteristic "doublet" corresponding to an intact molecule and the molecule lacking a hydroxyl group, which is suitable quantitative fractional analysis.

(MCT, CNPq, FINEP)

## USO DA TÉCNICA MALDI PARA VERIFICAR A INTEGRIDADE MOLECULAR DE UMA PROTEÍNA COM MASSA DA ORDEM DE 64000 U

I. De La Sierra<sup>a</sup>, S. Della-Negra<sup>b</sup>, C. Deprun<sup>b</sup>, Y. Le Beyec<sup>b</sup>, L. Pernot<sup>a</sup>, R. R. Pinho<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire d'Utilisation de Rayonnement Electromagnétique (LURE), Univ. Paris XI, France;

<sup>b</sup> Institut de Physique Nucléaire (IPN), Orsay, France; <sup>c</sup> Departamento de Física, PUC-Rio, Brasil

**Palavras-Chave:** MALDI, proteína, laser, espectrometria de massa, tempo-de-vôo

Atualmente, a técnica MALDI (Matrix Assisted Laser Desorption-Ionization) tem sido bastante utilizada na espectrometria de massa por tempo-de-vôo de grandes moléculas. Em MALDI, pulsos de laser de N<sub>2</sub> (337 nm) incidem em alvos, consistindo das amostras a serem analisadas, imersas em matrizes. A matriz é utilizada de forma a absorver a energia do laser e assim, transferir esta energia de forma mais suave (energia vibracional) às moléculas da amostra, fazendo-as ejetar (desorver) da superfície, intactas. Uma proteína com massa em torno de 64000 u foi sintetizada por pesquisadores do LURE e enviada à IPN-Orsay para análise. O objetivo foi o de verificar se a amostra sofria degradação (perda de aminoácidos) com o tempo. A proteína seria utilizada numa vacina contra meningite. Três tipos de amostras, conservadas à 4°C, foram analisadas: 1) A P64K2.1, conservada durante dois dias e analisada no terceiro dia após a sua preparação; 2) A P64K2.2, conservada durante 13 dias, sendo analisada em seguida e 3) A P64K1, conservada durante 8 dias, sendo analisada em seguida. Esta amostra sofreu uma degradação proposital, a fim de servir de comparação para as outras amostras. As amostras foram preparadas em soluções contendo Tris(hidróximetil)aminometano, utilizado como estabilizador. Como matriz foi utilizado o ácido sinapínico. Foi constatado que após 13 dias, a proteína sofreu degradação, com uma perda de 10000 u.

(CAPES)

## INTERACTION OF BIOMACROMOLECULES WITH WATER SOLUBLE PIGMENTS POSSESSING HIGH $\pi$ -COGNUGATION. AGGREGATION PHENOMENA.

*Iouri Borissevitch and Marcel Tabak*

Instituto de Química de São Carlos, USP, São Carlos, SP, Brasil

**Keywords:** organic pigments, biomacromolecules, aggregation.

The interest to the interaction of organic pigments and dyes possessing high light absorption in red and near infrared spectral regions with different biological and model systems has increased significantly over the last decade due to application of natural and synthetic pigments in medicine for diagnostics and treatment of cancer, HIV, etc. Porphyrins, for instance, are applied as active compounds in fluorescence, radiological and Magnetic Resonance Imaging cancer detection and as photosensitizers in its photodynamic therapy. As porphyrins have some disadvantages (neurotoxicity, affinity to skin) other compounds are being looked for which could substitute them. Polychromophoric cyanine dyes, which have high light absorption, fluorescence and triplet quantum yield appear very promising.

The presence of chromophores with high  $\pi$ -cognugation is the common property of organic pigments. The  $\pi$ -cognugated systems have the tendency to form aggregates in solutions in the presence of polymers.

In the present work we demonstrate this on the example of six water soluble porphyrins and four polychromophoric cyanine dyes interacting with DNA and albumins using the optical absorption, fluorescence, <sup>1</sup>H NMR, ESR and resonance light scattering spectroscopies. The characteristics of the aggregates appear to depend on the spacial structure and charge of both the pigment and the macromolecule. The aggregation changes the reaction abilities, paramagnetic properties, spectral characteristics, energies, lifetimes and quantum yields of singlet and triplet states of pigment molecules. This should be taken into account at their medical application.

(Support: CNPq, FINEP, FAPESP)

## ESTADOS EXCITADOS DO OXIGÊNIO NA ATMOSFERA TERRESTRE

*Stella M. L. Melo, B. R. Clemesha, H. Takahashi*  
Divisão de Aeronomia, INPE, São José dos Campos, SP.

*Palavras-Chave: oxigênio, espectroscopia, atmosfera*

Uma das propriedades da atmosfera terrestre é a emissão contínua de radiação amorfa, denominada aeroluminescência, cujo espectro estende-se do ultravioleta ao infravermelho. Em todo esse espectro é preponderante a presença de emissões do oxigênio. A emissão mais intensa do oxigênio molecular é o sistema O<sub>2</sub> atmosférico ( $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ ), que ocorre na região do infravermelho. No visível é marcante a presença da linha verde OI 557,7 nm e na região do ultravioleta os sistemas O<sub>2</sub> Herzberg I ( $A^3\Sigma_u^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ ), O<sub>2</sub> Herzberg II ( $c^1\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ ) e O<sub>2</sub> Chamberlain ( $A^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g$ ) dominam o espectro. Embora existam vários trabalhos neste sentido, uma descrição físico-química destas emissões ainda não foi estabelecida. Do ponto de vista aeronômico, a importância de se conhecer a físico-química associada às emissões do oxigênio reside na possibilidade do uso de medidas dessas emissões para monitorar a concentração de oxigênio atômico na atmosfera entre 90 e 100 km de altura. Neste trabalho apresentamos resultados da análise de perfis verticais das emissões OI 557,7 nm, banda (0-0) do Sistema O<sub>2</sub> atmosférico e Sistema O<sub>2</sub> Herzberg I, em termos dos processos de formação e perda dos estados O(<sup>1</sup>S), O<sub>2</sub>( $b^1\Sigma_g^+$ ) e O<sub>2</sub>( $A^3\Sigma_u^+$ ). Tais perfis foram derivados de dados obtidos via fotômetros instalados a bordo de um foguete de sondagem, lançado de Alcântara (2°S, 44°O) a 31 de maio de 1992, às 23:52, tempo local. Nossos resultados, no caso dos estados O(<sup>1</sup>S) e O<sub>2</sub>( $b^1\Sigma_g^+$ ), dão suporte ao mecanismo de formação em duas etapas com os coeficientes de formação e perda sugeridos por McDade et al. (1986a). No caso do estado O<sub>2</sub>( $A^3\Sigma_u^+$ ), nossos resultados sugerem um coeficiente de perda por colisões com O<sub>2</sub> e/ou N<sub>2</sub> maior que os propostos com base em outros dados aeronômicos, mas em acordo com resultados recentes de laboratório. Tratam-se dos primeiros resultados da mesosfera equatorial.

(CNPq)

## FOTOABSORÇÃO MOLECULAR NO MEIO INTERESTELAR

*Heloisa M. Boechat Roberty*  
Observatório do Valongo, UFRJ

*Carlos A. Lucas*

Dep. de Físico-Química, Instituto de Química, UFF

*M. Luiza M. Rocco\**

*G. Gerson B. de Souza\**

\*Dep. de Físico-Química, Instituto de Química, UFRJ

*Palavras-Chave: moléculas, meio interestelar, força do oscilador*

A matéria interestelar provoca a extinção da radiação eletromagnética emitida pelas estrelas devido aos processos de absorção e espalhamento. A curva de extinção interestelar na região do Ultravioleta de Vácuo, determinada a partir de dados obtidos com satélites, possui uma banda larga centrada em 2175 Å (5,7 eV), com uma largura de aproximadamente 480 Å. Tem sido sugerido que este pico é devido à absorção por pequenos grãos de grafite e pelos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs). Acredita-se que os PAHs ao absorverem o UV sofrem um rearranjo energético e emitem as bandas no infravermelho observadas em objetos como nebulosas planetárias e de reflexão e regiões III. Espectros de perda de energia de elétrons na região do Ultravioleta de Vácuo foram obtidos em laboratório em diversos ângulos de espalhamento e confirmamos a presença de intensas transições eletrônicas. Determinou-se a seção de choque e a força do oscilador generalizada (FOG) em função do quadrado do momentum transferido ( $K^2$ ) das transições:  $^1E_{1u} \leftarrow ^1A_{1g}$  (6,8 eV) do benzeno,  $^1B_{2u} \leftarrow ^1A_{1g}$  (5,8 eV) do naftaleno e  $^1B_{3u} \leftarrow ^1A_{1g}$  (5,4 eV) do antraceno. Sabe-se que para ângulos de espalhamento próximos de zero ( $K^2 \rightarrow 0$ ), os elétrons incidentes comportam-se como pseudofótons, os espectros de perda de energia são similares aos espectros de fotoabsorção e a FOG tende a força do oscilador óptico (FOO). Este estudo fornece portanto dados espectroscópicos e conclui que estes compostos podem contribuir para a extinção interestelar.

## FORMAÇÃO DE POSITRONIO (Ps) EM HELIO E ARGONIO LIQUIDOS, SOB A INFLUENCIA DE UM CAMPO ELETRICO.

*I. Pepe, D. A. L. Paul\*, F. Gimeno-Nogues\*\*, J. Deutsch\*\* e R. Prieels\*\**

Instituto de Física - UFBA

\* University of Toronto - Canada

\*\* Institut de physique - Université Catholique de Louvain - Belgique

*Palavra Chave* : positrônio, hélio, argônio

Dando sequência ao nosso trabalho [1] de medida do tempo de vida e fração de formação de positrônio em líquidos criogênicos, fizemos novas medidas em hélio líquido a 4.19, 2.92, 2.14 e 1.67 K, com e sem campo elétrico.

Mesmo que o espectro temporal de aniquilação de positronio tenha três componentes (para-positronio (p-Ps), orto-positronio (o-Ps) e as aniquilações dos positrons livres), as dimensões dos nossos detectores só permitem o estudos das duas ultimas coponeites citadas.

O tempo de vida do orto-positrônio é independente do campo até 20 kV/cm. A 4.19 K, para campos entre 0 e 20 kV/cm, não é observado crescimento na fração de Ps (19.5%) formada, entretanto para campos superiores é observado um pequeno crescimento (1%) desta componente. Este crescimento coincide com uma diminuição do tempo de vida dos pósitrons livres.

É importante resaltar que a 4.19K, o tempo de vida dos pósitrons livres cresce com o aumento do campo elétrico, até alcançar um valor constante de 2.14 ns à 5 kV/cm. Este aumento fica menos marcado nas medidas a 2.92 kV/cm.

Em argônio líquido as medidas foram feitas a 86 K, com campo elétrico entre 0 e 20 kV/cm. Para valores de campo superiores a 20 kV/cm observamos centelhamento por fuga de alta tensão.

Neste líquido o orto-positrônio apresenta uma intensidade relativa de 7%, a campo nulo, que começa a crescer a partir de 2.5 kV/cm, chegando a 13% a 20 kV/cm. O tempo de vida do o-Ps também sofre um crescimento de 8%, dentro desta mesma gama de campo.

[1] Os resultados do estudo de formação de Ps em nitrogênio líquido foram apresentados no XVIII ENFMC.

### MAGNETO-OPTICAL TRAP NEAR A SURFACE

*Martine Chevrollier, E. G. de Lima, O. Di Lorenzo, A. Lezama\* and M. Oriá*

Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba

\*Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la Republica, Montevideo

**Key Words:** van der Waals atom-surface interaction, cold atoms

The behaviour of atoms near a surface has been the object of many recent investigations. The effects of the atom-surface interaction become important and cannot be neglected at distances of the order of the radiation wavelength associated to the optical atomic transitions. These effects are related to cavity-QED[1], and must be taken into account on the description of the observed selective reflection lineshapes[2]. With a thermal vapour the signature of this atom-surface interaction is nevertheless an averaged signal with contributions from atoms in all classes of velocities and distances from the interface. It is therefore relevant for spectroscopic purposes to produce atoms at rest precisely positioned in the vicinity of a surface: providing a source of cold atoms near a surface would be important either for high resolution spectroscopic purposes, or to explore eventual new structures of the atomic levels in the attractive potential of the surface. In this work we describe the realization of a magneto-optical trap[3] for cesium atoms in a small moveable cell. Computer simulations for conditions equivalent to the experimental ones allowed us to explain the main features of the measurements. Our simulations give a good insight to the observed behaviour of the trapped atoms near the cell window: the dramatic reduction of the number of trapped atoms when the centre approaches the surface is mainly due to the geometric limitations of the configuration used, that result in a reduction of the capture region. The observation of a cloud of cold atoms trapped at a distance of less than 50  $\mu\text{m}$  from the surface opens the way to new experiments of atom-surface interaction.

1- S. Haroche and D. Kleppner, Phys. Today jan. 1989, p.24; D. Meschede, Phys. Reports 211(1992)201-250.

2 - M. Oriá, M. Chevrollier, D. Bloch, M. Fichet, and M. Ducloy, Europhys. Lett. 14(6) 527 (1991); M. Chevrollier, M. Fichet, M. Oriá, G. Rahmat, D. Bloch, and M. Ducloy, J. Phys. II (Paris) 2, 631 (1992).

3 - C. Monroe, W. Swann, H. Robinson, and C. Wieman, Phys. Rev. Lett. 65, 1571 (1990).

## EXPERIMENTOS EM SUPRESSÃO DE COLISÕES FRIAS COM ÁTOMOS DE CÉSIO

*Renato Ejnisman, Débora M.B.P.Milori, Aparecida M. Tuboy, Patricia S. P. Cardona, Vanderlei S. Bagnato*

Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* colisões atômicas; supressão óptica; armadilhas magneto-ópticas

Amostras de átomos frios têm se mostrado sistemas adequados para a investigação de colisões atômicas. A baixa energia dos parceiros da colisão torna possível a observação de passos intermediários no processo de encontro atômico, bem como a realização de novos efeitos, como é o caso da blindagem óptica recentemente apresentada na literatura [1,2]. Neste efeito, a presença de fótons adequadamente sintonizados faz com que átomos sofram uma repulsão ao atingirem certa distância internuclear, transformando a interação atômica numa do tipo de esfera dura com tamanho controlado pela energia do fóton. Utilizando este efeito, é possível suprimir colisões cujos canais envolvem fenômenos que ocorrem a curto alcance. Utilizando uma armadilha de átomos de césio, realizamos vários experimentos que mostram o efeito de desbalanço de intensidade dos feixes de luz, competindo com o procurado efeito de supressão de colisões envolvendo mudanças de estrutura hiperfinas.

1- L. Marcassa et al, Phys. Rev. Lett. 73, 1911 (1994)

2- V. Sanchez-Villicana et al, Phys.Rev.Lett. 74, 4619 (1995)

(Fapesp, CNPq)

## Aprisionamento Simultâneo de Duas Espécies Atômicas Distintas em uma Armadilha Magneto-Ótica

*M.S. Santos, P. Nussenzveig\*, L.G. Marcassa, K. Helmerson†, J. Flemming, S.C. Zilio e V.S. Bagnato*

Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* Lasers, Aprisionamento de Átomos, Colisões Frias

Nós produzimos a primeira armadilha magneto-ótica que confina simultaneamente duas espécies atômicas distintas: Sódio e Potássio. Para podermos realizar este aprisionamento, foi necessário vencer algumas dificuldades técnicas que justificam, inclusive, a escolha dos elementos utilizados. Em primeiro lugar, como realizamos o aprisionamento em célula de vapor, as pressões de vapor diferentes devem ser levadas em conta para o bom funcionamento da armadilha. Escolhemos o Sódio e o Potássio por terem pressões de vapor semelhantes e os colocamos em reservatórios separados com temperaturas controladas independentemente. Além disso, para produzir as polarizações circulares necessárias usamos rimbos de Fresnel ao invés de lâminas de quarto de onda. Finalmente, nossa armadilha é realizada com seis feixes independentes (para cada espécie) a fim de evitar um desbalanço de intensidade.

Nossa armadilha também foi utilizada para realizar o primeiro estudo de colisões frias entre átomos de espécies diferentes. Experimentalmente, as informações sobre essas colisões são obtidas através da medida da dinâmica de perdas da armadilha de Sódio em presença e ausência de átomos frios de Potássio. Observamos que o efeito de colisões heteronucleares é dez vezes menor do que as homonucleares. Esta diferença já era esperada devido ao menor alcance dos potenciais de interação entre átomos no caso de espécies distintas. Nossos resultados são comparados a uma teoria semi-clássica simples e se encontram em bom acordo com as previsões. Esta experiência deve abrir caminho para novas investigações com átomos frios aprisionados, em particular, o estudo do processo de formação da molécula NaK e estudos termodinâmicos.

\*Endereço Permanente: Instituto de Física - Universidade de São Paulo

†Endereço Permanente: National Institute of Standards and Technology, PHYS A167, Gaithersburg, MD 20899

## BROAD HISTOGRAM METHOD

*Paulo Murilo Castro de Oliveira*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Key words:* Monte Carlo, histogram

In Monte Carlo computer simulation, instead of counting all the possible states of the system, averages are performed among a finite set of them randomly sampled according to some prescription. Usually, one uses the canonical fixed temperature approach, forcing the user to repeat the simulation many times for other temperature values. In order to circumvent this, the histogram Monte Carlo method was invented long time ago [1]. It consists in measuring the energy probability distribution under a fixed temperature, and reweighting the result for another (not simulated) temperature. Unfortunately, this beautiful idea does not work in practice due to the narrow width of the probability distributions occurring in large systems: the reweighted distribution will be important outside the peak region of the truly simulated distribution, and hence where the statistics is poor. Reference [2], for instance, treats only tiny  $20 \times 20$  lattices.

By using completely general arguments avoiding exponentially decaying Boltzmann factors, I introduce here a new method to measure directly the density of states as a function of the energy, which is enough to obtain any thermodynamic average. The method is shown to be exact for the Ising ferromagnet in one dimension, and tested for the same model in two dimensions: I am able to reproduce quite well the exactly known specific heat curves within some computer hours on a PC.

[1] Z.W. Salsburg et. al., *J. Chem. Phys.* **30**, 65 (1959).

[2] A.M. Ferrenberg and R.H. Swensen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).

(CAPES, CNPq, FAPERJ e FINEP)

## TEORIA DE CAMPOS E FENÔMENOS CRÍTICOS PARA UMA CADEIA POLIMÉRICA DE HUBBARD

*Ernesto P. Raposo e Maurício D. Coutinho-Filho*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
Cidade Universitária, 50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras-Chave:* modelo de Hubbard, teoria de campos, fenômenos críticos

Estudamos uma cadeia losangular de Hubbard cuja topologia acarreta um estado fundamental ferrimagnético para banda semi-cheia<sup>1</sup>, como prevê o teorema de Lieb<sup>2</sup> para redes bipartidas. Construímos uma teoria de campos usando uma representação de integração funcional de estados coerentes no limite de acoplamento forte do modelo, isto é, repulsão Coulombiana muito maior que a integral de hopping. A extremização da ação reproduz os três modos de ondas de spin, com dispersão ferromagnética, previamente derivados num formalismo semi-clássico de operadores de Holstein-Primakoff<sup>3</sup>. Em seguida estudamos a ação no limite contínuo de baixas energias. O propagador livre encontrado aponta para a existência de transição de fase a temperatura  $T=0$  e campo magnético  $h=0$ :  $G^0(k, \omega_n) = k^2 - i\omega_n + \alpha w_n^2 g_0 h$ , onde a parte linear nas frequências de Matsubara, oriunda da presença de um termo de Wess-Zumino, reflete o ordenamento ferromagnético de longo alcance, enquanto que a parte quadrática está associada à ordem local de Néel dentro da célula unitária. Realizamos um estudo desse fenômeno crítico quântico via grupo de renormalização no espaço dos momentos. Por fim, analisamos também a influência topológica do termo de Wess-Zumino para o comportamento crítico deste sistema.

1. A.M.S. Macêdo, M.C. dos Santos, M.D. Coutinho-Filho e C.A. Macêdo, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 1851.

2. E.H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 1201.

3. E.P. Raposo e M.D. Coutinho-Filho, *Mod. Phys. Lett. B* **9** (1995) 817.

## DYNAMICS OF THE RANDOM TRANSVERSE ISING MODEL

*J. Florencio and F.C. Sá Barreto*  
Departamento de Física, IEX, UFMG

*Palavras-chave:* Correlation function, disorder, spin dynamics

We investigate the dynamics of the quantum spin-1/2 random transverse Ising model (RTIM) in one dimension, at the high temperature limit. We consider separately the disorder on the transverse field and on the exchange coupling constant. First, we allow the transverse field  $B_i$  to assume two possible values, namely,  $B_1$  and  $B_2$ , with probabilities  $p_B$  and  $1 - p_B$ , respectively. Then we let  $J_{ij}$  assume two values  $J_1$  and  $J_2$ , with probabilities  $p_J$  and  $1 - p_J$ . These mixed-type models are important in the dynamical properties of hydrogen (deuteron)-bond order-disorder ferroelectrics, since hydrogen and deuteron have different tunneling frequencies within the bonds of those ferroelectric crystals. We modify the method of recurrence relations to account for the averaging over the random exchange coupling constants and the random transverse fields, which are drawn independently from their bi-modal distribution functions. Next we apply the method of recurrence relations to obtain the time-dependent spin autocorrelation functions and the spectral functions for several values of the disorder parameters. We obtain the first *nine* moments, and also the ensuing *eight* coefficients of the continued fraction representation of the spectral function. Our results show that the dynamics of the system changes according to the concentration of  $B$  or  $J$ . For the pure cases, two distinct behaviors appear, according to the concentrations. Basically, when  $B < J$  a central-peak behavior dominates the dynamics, whereas for  $B > J$  a collective-mode behavior is the main mode. For the disordered situations the general dynamical behavior of the system is neither central-peak nor collective-mode like. We obtain a crossover on the dynamics from a central peak behavior into a collective mode behavior as a function of the disorder.

## MODELO DE BOSE-HUBBARD COM RESTRIÇÃO DE DOIS BÓSONS POR SÍTIO

*Juan P. Neirotti e Mário J. de Oliveira*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo

*Palavras-Chave:* modelo de Bose-Hubbard, método de Monte Carlo

O modelo de Bose-Hubbard [1] exibe num diagrama potencial químico versus acoplamento, um conjunto (lóbulos) de fases isolantes de Mott em que a densidade é fixa e comensurável, e uma fase superfluida com a ordem usual de longo alcance não diagonal. Para valores baixos do potencial químico, o número de bósons por sítio deve ser pequeno. Nesse caso é possível descrever o modelo de Bose-Hubbard por um hamiltoniano de spins dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + D \sum_i (S_i^z)^2 - H \sum_i S_i^z$$

com  $S=1$ . Estudamos o estado fundamental dessa hamiltoniana usando aproximação de campo médio e, no caso unidimensional, através de grupo de renormalização de matriz densidade, através do método de Lanczos e do método de Monte Carlo [2]. O método de Lanczos é utilizado para o caso de cadeias curtas até 16 sítios. Para cadeias maiores usamos o método de Monte Carlo. Extrapolações para cadeias infinitas dão resultados qualitativamente semelhantes aos obtidos para o lóbulo inferior do modelo completo de Bose-Hubbard.

[1] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546, (1989).

[2] J. P. Neirotti and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **53**, 668 (1995).

(CAPES)

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA A PERCOLAÇÃO CORRELACIONADA

*Marcelo Medeiros e C.M. Chaves*

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

*Palavras-Chave:* percolação correlacionada, universalidade, simulação numérica

Modelos de percolação correlacionada fornecem uma descrição mais realista e mais apropriada para muitos sistemas físicos. Exemplos são os magnetos diluídos que, sob certas condições, apresentam um momento magnético num sítio ocupado por uma espécie magnética, somente se este sítio tiver um número suficiente de vizinhos também magnéticos. O modelo que incorpora este aspecto é a chamada percolação "bootstrap" (BP). Neste modelo, sítios são ocupados aleatoriamente com probabilidade  $p$  e então todos os sítios com menos de  $l$  vizinhos ocupados são permanentemente removidos.

Em diferentes aplicações, como a invasão por um fluido de um meio poroso, o processo cooperativo favorece a invasão de sítios (ou poros) se os sítios vizinhos estiverem já invadidos. A descrição apropriada do problema é através da percolação por difusão (DP). Neste modelo, sítios vazios tornam-se ocupados se tiverem pelo menos  $k$  vizinhos ocupados. Para ambos modelos de percolação,  $k, l \leq z$ , sendo  $z$  o número de coordenação da rede.

Resultados de grupo de renormalização para células pequenas e simulações em redes pequenas, sugeriam para estes problemas, um expoente  $\beta$  não universal dependente de  $l$  ou  $k$ .

Neste trabalho apresentamos resultados de simulação feita anteriormente nas redes quadradas e honey-comb bem como apresentamos resultados novos na rede triangular. Tamanhos razoavelmente grandes de redes ( $L \sim 12.800$  sítios) foram utilizados.

Nossos resultados são compatíveis com um expoente  $\beta$  universal para a percolação correlacionada, isto é, independente da rede, de  $l$  ou  $k$  e igual ao da percolação usual randômica.

(CNPq, MCT)

## SPIN-S BLUME-CAPEL MODEL: PAIR APPROXIMATION AND MONTE CARLO SIMULATIONS

*J. A. Plascak e D. Peña Lara*

Departamento de Física - ICEX - UFMG

*Palavras Chave:* Blume-Capel Model, Monte Carlo, Phase Diagram

The spin- $S$  Blume-Capel model is a simple generalization of the Ising model. For spin  $S = 1$  and  $d \geq 2$  the model has been extensively studied within several approximate schemes. However, for values of spin  $S > 1$  fewer results are available in the literature and some of them are contradictory. In this work the Blume-Capel model for general values of the spin  $S$  is studied within two different approaches: the pair approximation based on Bogoliubov inequality for the free energy, and Monte Carlo simulations. The global phase diagram in the temperature-anisotropy plane is obtained for general values of  $S$  in the pair approximation and the results are qualitatively the same as those of the usual mean field theory. Special interest is given in the low temperature region of the phase diagram where a number of first-order lines emerge from a multiphase point at the ground state. Monte Carlo simulations for  $S = 1, 3/2$ , and  $2$  on simple cubic lattices also confirm the general trend of the mean field like approach. In the special  $S = 3/2$  case the present results are in disagreement with previous Monte Carlo simulations, renormalization group calculations, and conformal field theories. It has been found that the unique first-order transition line terminates at an isolated multicritical point, contrary to the predictions from other works where this transition line ends up in the second-order high temperature transition line.

(CNPq,FAPEMIG)

## BIQUADRATIC EXCHANGE COUPLING IN SPUTTERED (100) Fe/Cr/Fe

*Antonio Azevedo, Carlos Chesman, Sergio Rezende and Flavio de Aguiar*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil  
and

*X. Bian and Stuart Parkin*  
IBM Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120, USA

**Keywords:** Thin magnetic films, exchange coupling, Brillouin light scattering

We have used Brillouin light scattering (BLS), ferromagnetic resonance (FMR), magneto-optical Kerr (MOKE) effect and magnetoresistance (MR) techniques to investigate the interlayer exchange coupling in Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å) trilayers grown onto MgO (100) in a ultra high vacuum sputtering system. Unprecedented strong room-temperature biquadratic exchange coupling (BEC) was found for values of the Chromium thickness  $t$  corresponding to a region where the Iron layers are weakly antiferromagnetically coupled. A common feature in both magnetic and transport measurements, which we take as a signature of the biquadratic exchange coupling, is the presence of sudden discontinuous jumps as the external magnetic field is varied. The Brillouin light scattering frequency versus in-plane magnetic field for  $H//[100]$ , correlates exactly with the magnetization curve. The results are in excellent agreement with model calculations which coherently take into account the same set of phenomenological parameters characterizing the anisotropy, Zeeman and bilinear and biquadratic exchange energies. We will present results of the simultaneous numerical simulation of the MOKE, BLS, FMR and MR data for the following set of realistic parameters:  $4\pi M_s = 19.0$  kG ( $M_s$ =magnetization saturation),  $J_1/M_s t_s = -150$  Oe,  $J_2/M_s t_s = 50$  Oe ( $t_s$ = Fe layer thickness) and  $2K_1/M_s = 550$  Oe ( $K_1$ =first order cubic anisotropy constant). To our knowledge, a coherent fit of the data from the various experimental techniques with the same set of parameters is provided for the first time.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE, Office of Naval Research (IBM))

## ESPALHAMENTO DE LUZ BRILLOUIN E FMR EM NiFe/Cu/NiFe

*Flavio de Aguiar, Sergio Rezende, Marcos Lucena, Carlos Chesman e Antonio Azevedo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil  
e

*Stuart Parkin*  
IBM Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120, USA

**Palavras-Chave:** filmes finos metálicos magnéticos, ondas de spin

As técnicas de espalhamento de luz Brillouin e de ressonância ferromagnética (FMR) foram utilizadas sistematicamente para caracterizar propriedades magnéticas do sistema NiFe/Cu/NiFe em temperatura ambiente. As amostras foram crescidas pela técnica de "magnetron sputtering" em ultra-alto-vácuo ( $10^{-10}$  Torr antes da deposição) em três substratos diferentes, nominalmente, MgO (100), MgO (110) e safira (0001). Para cada substrato, foram investigadas duas amostras com espessuras diferentes de NiFe (200 e 300 Å) para uma mesma espessura de Cu (25 Å). Nosso espectrômetro de BLS faz uso de um laser de Ar<sup>+</sup> ( $P \sim 70$  mW,  $\lambda = 5145$  Å); a luz espalhada é colimada e direcionada a um interferômetro Fabry-Perot de seis passagens de última geração e detectada por um dispositivo de estado sólido de baixo ruído acoplado a uma placa multicanal instalada em computador. Com essa técnica, medimos relações de dispersão do tipo "frequência vs campo aplicado" e "frequência vs vetor de onda" para diferentes direções do campo, aplicado no plano da amostra. A FMR (9.5 GHz) faz uso de um espectrômetro montado no DF-UFPE. Nesse caso, foram feitas medidas sistemáticas do campo de ressonância em função da direção do campo em relação aos eixos cristalinos no plano da amostra. Os resultados, interpretados com base na teoria de modos magnetostáticos em uma camada dupla de ferromagnetos, são indicativos de uma excelente monocristalinidade dos filmes, com uma surpreendente anisotropia nas amostras sobre MgO (110). O acoplamento entre as camadas de NiFe, se algum, é fracamente ferromagnético.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE, Office of Naval Research (IBM))

## COMPORTAMENTO MAGNETO-ÓPTICO DE BICAMADAS DE $YCo_2/GdCo_2$ AMORFOS EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA

*Taeko Yonamine e Antonio Domingues dos Santos*

Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras chave:* efeito Kerr transversal, bicamadas ferrimagnéticas amorfas, parede de domínios

Nosso objetivo atual é dar continuidade ao estudo de bicamadas ferrimagnéticas de  $YCo_2/GdCo_2$  amorfas, através do estudo do seu comportamento térmico. A principal característica desse tipo de sistema é a formação de uma parede de domínios na região da interface da bicamada, quando  $H \geq H_t$  (campo de transição). Essa parede é criada para minimizar a interação de troca entre átomos de cobalto, após a transição ferri-ferromagnética. Os filmes analisados foram produzidos com diferentes espessuras das camadas, utilizando um equipamento Edwards de deposição por feixe eletrônico e um "sputtering". A determinação de espessura e composição dos filmes foi feita através da análise dos espectros de RBS. A caracterização magnética em função da temperatura, no volume do filme, foi efetuada utilizando-se o magnetômetro de amostra vibrante. A caracterização magneto-óptica foi feita utilizando-se: o Magnetômetro à Efeito Kerr (MEK) e o Magnetômetro à Efeito Kerr em baixas temperaturas (MEK-bt). O MEK fornece, além das curvas de histerese, medida de susceptibilidade transversal magneto-óptica ( $\chi_t$ ), através da qual podemos extrair o valor do campo de anisotropia de cada camada do filme. O MEK-bt fornece o mesmo tipo de medida só que em temperaturas entre 7 e 300K. À temperatura ambiente, todos os filmes analisados apresentaram a camada  $GdCo_2$  como a camada de menor momento magnético, ou seja, a camada que inverte na transição. Abaixo de 200K, nós passamos a observar a inversão da camada  $YCo_2$ . Esse comportamento é explicado pela acentuada dependência da magnetização do Gd com a temperatura. Do modelo teórico, desenvolvido para descrever a parede de domínios, resultaram três equações interdependentes, relacionando espessura de parede ( $\delta$ ), posição relativa da parede ( $\Delta$ ) e constante de troca (A). Os valores de  $\delta$ ,  $\Delta$  e A de cada filme, para diferentes temperaturas, serão apresentados.

(FAPESP, FINEP e CNPq)

## ESTUDO MAGNÉTICO E MAGNETO-ÓPTICO DE FILMES AMORFOS DE TERRA RARA-COBALTO

*Adriana P. Biscaia Tufaille e Antonio Domingues dos Santos*

Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Dep. Física dos Materiais

*Palavras-Chave:* magneto-óptico, amorfo, terra rara-metal de transição.

Construímos um magnetômetro que opera em baixas temperaturas (6.5K a 300K), baseado no Efeito Kerr Magneto-Óptico Transversal. Esse efeito consiste na variação da refletividade, quando da variação da magnetização de um ferromagneto. Isso se deve ao fato que os fenômenos magnéticos, devidos aos spins eletrônicos, interferem nas propriedades ópticas, devidas aos orbitais eletrônicos, através do acoplamento spin-órbita. Nesse magnetômetro a amostra fica em vácuo dentro de um criostato com janelas ópticas, o criostato permite a variação e controle da temperatura e opera com fluxo contínuo de hélio líquido. Para aplicar o campo magnético à amostra é utilizado um eletroímã que fornece até 2T. Junto ao criostato há uma fonte laser de semiconductor (cuja intensidade é modulada por um sinal de referência), associado a um sistema de detecção síncrona. O feixe laser ( $\lambda=670nm$ ) passa pelo polarizador e é focalizado na amostra. O feixe de luz é refletido pela amostra é detetado pelo fotodiodo, após a passagem por um polarizador analisador. O trabalho consiste no estudo das propriedades magnéticas e magneto-ópticas de filmes finos amorfos de terra rara-cobalto. O sinal magneto-óptico medido é a variação relativa de refletividade  $\Delta R/R$ . Devido à dependência espectral, esse sinal é proporcional à magnetização do elemento metal de transição do filme. Comparando-se a dependência com a temperatura das curvas de magnetização e do sinal Kerr  $\Delta R/R$ ; infere-se a contribuição de cada elemento na liga. Em particular, para um filme de  $DyCo_2$ , abaixo de 200K o momento do Dy é maior que o momento do Co; enquanto que para temperaturas superiores ocorre o inverso. A magnetização global da amostra em função da temperatura é medida utilizando-se um Magnetômetro de Amostra Vibrante numa bobina supercondutora (9T).

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## FILMES FINOS MAGNÉTICOS DE CoCr COM ANISOTROPIA PERPENDICULAR

*Eliane F. Chinaglia, Ivette C. Oppenheim, Roberto M. Fernandez e Frank P. Missel*  
Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, Instituto de Física - USP

*Palavras-Chave* : filmes finos, anisotropia magnética, CoCr

Filmes finos de CoCr com anisotropia perpendicular à superfície do filme tem sido amplamente estudados para aplicação em gravação magnética digital, devido à possibilidade de obtenção de alta densidade de gravação. Neste caso, a mídia de gravação possui forte anisotropia e fácil magnetização perpendicular à superfície do filme. Acredita-se que a origem da anisotropia perpendicular nestes filmes é devida à sua microestrutura colunar. A obtenção desta microestrutura é controlada através dos parâmetros de deposição do filme e do material da subcamada. Para verificarmos os efeitos de cada um dos parâmetros, estudamos vários filmes de CoCr em função da temperatura de deposição, do material da subcamada (Ti) e do % de Cromo no filme magnético. Os filmes foram depositados sobre substratos de Si com textura {111}, recobertos com um filme amorfo de C, utilizando o processo de evaporação por canhão de elétrons. Foram caracterizados em composição e espessura por Rutherford Backscattering Spectroscopy, suas propriedades magnéticas foram obtidas utilizando-se o Magnetômetro de Efeito Kerr e o Magnetômetro de Amostra Vibrante, e sua textura cristalina por Difractometria de Raio-X. Os resultados obtidos mostram um decréscimo da magnetização de saturação com o aumento da concentração de Cr no filme. Mostram também uma tendência na obtenção de maiores valores de campo coercivo em filmes depositados a temperatura de 150°C sobre a subcamada de Ti e com composição Co<sub>82</sub>Cr<sub>18</sub>. Acima de 150°C a textura {0002} do filme magnético mostra-se independente da temperatura para filmes depositados sobre a subcamada de Ti e decrescente para filmes depositados sem a subcamada de Ti. Podemos dizer que a obtenção de altos campos coercivos depende tanto da textura do filme, responsável pela anisotropia perpendicular, como da concentração de Cr no filme e da temperatura do substrato, responsáveis pelo isolamento do grão magnético.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## ESTUDO DO RUÍDO E CARACTERIZAÇÃO MAGNÉTICA EM FILMES FINOS DE LIGAS BINÁRIAS DE CoCr

*Roberto M. Fernandez, Ivette C. Oppenheim, Eliane F. Chinaglia, Frank P. Missel*  
Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, Universidade de São Paulo - SP

*Palavras-Chave*: filmes finos, coercividade, ruído

O contínuo desenvolvimento da informática nos últimos anos tem sido acompanhado pelo aumento da demanda de dispositivos com alta capacidade de armazenamento de informações desenvolvidos a partir da tecnologia de filmes finos de ligas de Co. No entanto, altas densidades de gravação em filmes de Co são limitadas pelo ruído na mídia. Neste trabalho, discutiremos as propriedades magnéticas e de ruído como função da textura cristalográfica em filmes finos com anisotropia magnética longitudinal produzidos por evaporação por canhão de elétrons.

A estrutura básica dos filmes é composta por uma subcamada de Cr sobre a qual se deposita epitaxialmente uma camada magnética de CoCr, ambas depositadas em uma determinada temperatura. As composições dos filmes foram determinadas por espectroscopia de retroespalhamento Rutherford (RBS) e análise de ressonância nuclear. As caracterizações das texturas cristalográficas foram obtidas por difração de raios-X (DRX). As propriedades magnéticas e de ruído das amostras foram determinadas utilizando-se os magnetômetros de amostra vibrante (MAV) e de efeito Kerr (MEK).

Pela análise efetuada por difração de raios-X, há evidências que o aumento do valor do campo coercivo deve-se à mixagem entre texturas "hcp" do Co. A partir da teoria de Wohlfarth para um sistema de partículas não interagentes, foi possível investigar as origens e magnitudes do ruído nas amostras de filmes finos através da construção das curvas  $\delta M$  correlacionando o ruído com a interação de "exchange" intergranular. A técnica utilizada fornece um método bastante eficaz para análise da performance da mídia.

(CNPq, FAPESP, CAPES)

## ANÁLISE COMBINADA DE FILMES FINOS MAGNÉTICOS POR PIXE E RBS

*Manfredo H. Tabacniks<sup>1</sup>, Andrew J. Kellock<sup>2</sup> e John E.E. Baglin<sup>2</sup>*

1) Instituto de Física - USP, 2) IBM Almaden Research Center, CA, EUA

*Palavras-Chave:* RBS, PIXE, filmes magnéticos

Na análise de filmes finos por feixes iônicos, os métodos PIXE (Particle Induced X-Ray Emission) e RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) apresentam características notavelmente complementares com respeito à discriminação de elementos vizinhos e comportamento recíproco das respectivas secções de choque e limites de detecção em função do número atômico. Ao combinar as informações obtidas na análise de uma amostra por ambas as técnicas, é possível discriminar e quantificar elementos cujos sinais de RBS interferem entre si. A alta resolução e sensibilidade do método PIXE permite identificar e quantificar os componentes elementares numa amostra (em átomos/cm<sup>2</sup>) cujos resultados podem então ser utilizados na análise RBS para restringir os parâmetros de entrada em simulações de perfis em profundidade consistentes. Para ilustrar o poder da análise combinada PIXE+RBS foram analisadas estruturas típicas de sensores magnéticos multicamada cujos elementos Mn, Fe, Ni, Co, Cu, com espessuras individuais entre 10 e 100 Å, se superpõe de forma notável num espectro RBS tornando sua análise praticamente impossível. Com a pré-quantificação da composição total por PIXE as espessuras e perfis em profundidade de cada camada pode ser simulada em espectros RBS com precisão de  $\pm 1$  a  $\pm 4\text{Å}$ . (FAPESP)

## PROCESSO E MECANISMO DE RELAXAÇÃO EM COMPLEXO DE RÓDIO DIVALENTE

*José Aguiar Coelho Neto e Ney Vernon Vugman*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Centro de Tecnologia  
Bloco A - 21945 / 970 - Rio de Janeiro - Brasil, e-mail: ney@if.ufrj.br

*palavras-chave: ressonância, relaxação, metais de transição*

O complexo  $[Rh(CN)_6]^{4-}$  em rede de KCl é paramagnético com um estado fundamental  $d_{22}$  e simetria  $D_{4h}$ . Os tensores g- e hiperfinos são anisotrópicos e dependem da temperatura devido a presença de vibrações anarmônicas [localizadas [N. V. Vugman and W. O. Franco, Physics Letters A 155, 516 (1991)]].

A técnica de recuperação de inversão, na faixa de temperaturas de 4.7 até 25 K, foi utilizada para medir os tempos de relaxação spin rede,  $T_1$ . Os dados experimentais ajustam-se muito bem a um processo de relaxação do tipo Orbach ressonante a dois fonons, com um estado excitado situado a uma energia de  $(36 \pm 3) \text{ cm}^{-1}$ . Para este complexo fortemente covalente, basta uma pequena distorção da simetria octaédrica para colocar o primeiro estado excitado eletrônico em energia bem superior. A pequena diferença de energia medida é associada ao acoplamento vibrônico com o modo de vibração localizado  $A_{2u}$ , em bom acordo com a literatura ( $37 \text{ cm}^{-1}$ , referência acima).

Experiências de variação angular mostram que os tempos de relaxação spin-rede são anisotrópicos, com simetria axial em relação ao eixo principal de simetria da molécula. As taxas de relaxação ajustam-se muito bem com a dependência angular da interação hiperfina com os nitrogênios axiais. Este resultado sugere fortemente que o principal mecanismo de relaxação é a modulação desta interação hiperfina, como consequência dos modos localizados de vibração.

(( FINEP, CNPq, FUJB, CEPG-UFRJ))

## Current Echoes

*I.S. Oliveira*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil

*Palavras-chave:* Bloch equations, spin echoes

A matrix method has been applied to solve the electron equation of motion in electric and magnetic fields. The analogy between this problem and that of an ensemble of nuclear spins in a magnetic field, described by the Bloch equations, leads to transient solutions similar to spin echoes, which we shall call *current echoes*, a phenomenon not yet observed experimentally. First we calculate the components of the electrical current under a continuous AC magnetic field superimposed on static electric and magnetic fields. In this context we introduce the rotating reference frame and obtain expressions for the components of the Hall current at the resonance in that system. Then we consider transverse pulsed magnetic fields and derive expressions for transient effects, similar to the *free induction decay* and *spin echo* in the nuclear case. The experimental observation of the described transient effects in the electrical current requires long relaxation times ( $\tau$ ) compared to the duration of one experiment, and should in principle be achieved in high-purity single crystals at ultra-low temperatures. Another possible system are type-II superconductors. For the case of one single applied AC magnetic pulse of duration  $\tau_p$  it is shown that the electrical current will be reversed when the relation  $eB_1\tau_p/m = 3\pi/2$  is satisfied. Here  $e$  is the electron charge,  $B_1$  is the intensity of the AC field and  $m$  the electron mass. We give a calculated example for the components of the current echo in an inhomogeneous static field for a relaxation time  $\tau = 100\text{ns}$ . As in the nuclear case, the formalism can be easily generalized to include more than one relaxation time (corresponding, for instance, to *electron-electron* and *electron-lattice* relaxation times) which could be measured independently by appropriate pulse sequences.

## RMN DE ${}^7\text{Li}$ E ${}^{31}\text{P}$ DE FOSFATOS DE METAL-LÍTIO

M.A.Silva<sup>†</sup>, A.Goñi<sup>\*</sup>, T.Rojo<sup>\*</sup>, T.J.Bonagamba<sup>†</sup>, H.Panepucci<sup>†</sup>, G.E.Barberis<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Departamento de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos, USP, São Carlos, SP.

<sup>\*</sup> Departamento de Química Inorgânica, Universidad del País Vasco, Bilbao, Espanha.

<sup>†</sup> Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Campinas, SP.

*Palavras-Chave:* ressonância magnética nuclear, relaxação, fosfatos de metal-lítio

Fosfatos de Metal-Lítio têm sido estudados por diferentes técnicas, especialmente devido a mobilidade do Lítio, o qual pode ser frequentemente excitado termicamente, originando uma condutividade superiônica. Compostos de  $\text{LiMgPO}_4$  e  $\text{LiNiPO}_4$ , entretanto, demonstram uma condutividade iônica muito pequena, ao contrário de outros fosfatos de Metal-Lítio. Apresentamos neste trabalho, o estudo do  $\text{LiMgPO}_4$  através de RMN do  ${}^7\text{Li}$  (spin 3/2) e do  ${}^{31}\text{P}$  (spin 1/2). Os espectros de RMN do  ${}^7\text{Li}$  no  $\text{LiMgPO}_4$  são compostos por uma linha central, associada com a transição  $[+1/2, -1/2]$ , e um espectro quadrupolar com padrão de pó completamente resolvido, associado com as transições satélite  $[+3/2, +1/2]$  e  $[-1/2, -3/2]$ . Já os espectros de  ${}^{31}\text{P}$  apresentam apenas uma linha central. Medimos os tempos de relaxação spin-rede e as formas de linha de ambos os núcleos, como função da temperatura entre 150 K e 390 K. Todas as características espectrais dos espectros dos núcleos estudados bem como seus respectivos tempos de relaxação spin-rede mantiveram-se praticamente inalterados no intervalo de temperatura utilizado. Para todas as temperaturas, as larguras de linha do  ${}^7\text{Li}$  e  ${}^{31}\text{P}$  permaneceram em média, respectivamente, nos valores 4.6 KHz e 6KHz, e o acoplamento quadrupolar do  ${}^7\text{Li}$  em torno de 34KHz. Os tempos de relaxação spin-rede dos dois núcleos apresentaram valores semelhantes para cada temperatura utilizada, variando de 25 s a 55 s de forma crescente com a mesma. O comportamento da relaxação spin-rede e forma de linha do  ${}^7\text{Li}$  e do  ${}^{31}\text{P}$ , em conjunto com as medidas de condutividade iônica, mostraram uma pequena mobilidade dos ions  $\text{Li}^+$ . Predominantemente, as larguras de linha dos dois núcleos estudados são originadas pela interação dipolar magnética entre os núcleos de  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^{31}\text{P}$  e  ${}^{25}\text{Mg}$ . No caso do  ${}^7\text{Li}$ , existe uma pequena contribuição para a largura de linha através da interação quadrupolar elétrica e deslocamento químico anisotrópico.

## PERDA DIELÉTRICA EM MONOCRISTAIS DE $\text{LiNbO}_3\text{:Fe}$ e $\text{LiNbO}_3\text{:Cu}$

J.A.C.de Paiva , E.F. de Almeida , A.C. Hernandez \* , A.S.B. Sombra

Departamento de Física ,Laboratório de Ótica não Linear e Ciencia dos Materiais , Universidade Federal do Ceará , Caixa Postal 6030, 60450 Fortaleza, Ceará , Brasil

\* Instituto de Física e Quimica de São Carlos -USP São Carlos ,Brasil

Palavras Chave - Ferroelectricidade, Relaxação Dieétrica ,Dieletricos

Nos ultimos anos tem existido um enorme interesse no estudo das propriedades de  $\text{LiNbO}_3\text{:Fe}$  (LNFe) e  $\text{LiNbO}_3\text{:Cu}$  (LNCu) associados ao uso destes cristais ferroeletricos como memórias holográficas de volume . Estes hologramas são importantes para o uso em correlatores de imagem , redes ópticas , e memórias ópticas . O armazenamento de hologramas em LNFe esta associado a fotoexcitação de eletrons das armadilhas ocupadas e sua subsequente captura por armadilhas vazias . No ferro os ions  $\text{Fe}^{2+}$  correspondem as armadilhas ocupadas e os ions  $\text{Fe}^{3+}$  estão associados as armadilhas vazias . A concentração dos ions Fe e Cu desempenham um papel fundamental na determinação da sensibilidade de gravação , e eficiencia de difração maxima do holograma . Em trabalhos anteriores foi demonstrado que a razão  $\text{Fe}^{2+} / \text{Fe}^{3+}$  pode ser mudada por tratamentos termicos de oxidação e redução . Neste trabalho descrevemos o estudo da função dieletrica complexa como função de frequencia e temperatura de monocristais de  $\text{LiNbO}_3\text{:Fe}$  e  $\text{LiNbO}_3\text{:Cu}$  aonde foram detetadas a presença de relaxações dieletricas associadas aos ions de Fe e Cu respectivamente. Os cristais usados foram preparados pelo metodo de Czochralski no ar em cadinhos de platina. O ferro e o cobre foram adicionados na forma de óxidos . As amostras usadas foram cristais com dimensões  $10 \times 10 \times 1 \text{ mm}^3$  . As mediads dieletricas foram realizadas usando-se uma ponte de capacitancia da General Radio modelo 1615-A em conjunto com um lock-in EG&G modelo 5208 com um campo eletrico da ordem de  $25 \text{ V/cm}$  . As medidas a baixas temperatures foram realizadas com um criostato Superveritemp operando com estabilidade de temperatura na faixa de 0.1K. O processo de relaxação é bastante sensível ao tratamento termico e temperatura da amostra . Esta é a primeira observação deste processo de relaxação associados ao ion da impureza. A investigação destas propriedades é bastante importante em vista das aplicações de LNFe e LNCu em memórias holográficas de volume.

## TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA PARA UM OSCILADOR PIEZOELÉTRICO ANARMÔNICO

E.F.Bezerra\*, N.M.Barbosa Neto<sup>†</sup>, F.E.A.Melo<sup>†</sup>, M.P. da Silva\*, P.T.C.Freire<sup>†</sup>, I.G. da Silva<sup>†</sup>, J.Mendes Filho<sup>†</sup>

\* Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

<sup>†</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

Palavras-Chaves: transição de fase, piezoelectricidade, anarmonicidade

O cristal de sal de Rochelle é um cristal ferroeletrico que apresenta duas transições de fase. Abaixo de  $-18^\circ\text{C}$  e acima de  $24^\circ\text{C}$ , o cristal de sal de Rochelle tem estrutura ortorrômbica pertencendo ao grupo espacial  $P_{21212}$ . Entre estas temperaturas o material exhibe estrutura monoclinica (fase ferroeletrica) com grupo espacial  $P_{21}$ . Cristais ferroeletricos apresentam piezoelectricidade e podemos estudar transições de fase usando a técnica de ressonância piezoeletrica. O estudo de ressonância piezoeletricas em cristais de sal de Rochelle mostrou que o modo piezoeletrico de frequencia 430 kHz apresenta anomalias nas temperaturas próximas às suas temperaturas de Curie. As dependências da largura de linha e da intensidade deste modo com a temperatura mostram que nas temperaturas de transição, os modos piezoeletricos são fracamente acoplados com os modos acústicos, evidenciando que as deformações estruturais não induzem grandes deformações piezoeletricas no cristal. Uma discussão sobre transferência de energia para modos piezoeletricos é apresentada.

## ALTERAÇÕES NOS ESPECTROS DE RESSONÂNCIAS PIEZOELÉTRICAS INDUZIDAS POR UM CAMPO ELÉTRICO DC, NO SAL DE ROCHELLE.

*Daniel Palheta Pereira*

Escola Técnica Federal do Pará, Belém-Pa

*Sanclayton G. C. Moreira e L. S. G. Cancela*

Universidade Federal do Pará, Campus do Guamá. Belém-Pará.

O estudo de ressonâncias, de uma forma geral, em física é bem conhecido e existem uma série de dispositivos que mostram tal fenômeno. Porém, encontramos uma forma extremamente simples e inédita de se observá-las e pode ser utilizadas

Os espectros de ressonâncias piezoelétricas foram obtidos através do sistema de 3 eletrodos, onde a amostra de Sal de Rochelle foi estimulada por uma campo elétrico AC de amplitude 50 mV/mm, aplicado na direção do eixo piezoelétrico [010] e a resposta retirada em outra região na mesma direção. Com o auxílio de um micro-computador PC 486 e um Lock-in controlado pelo micro é possível varrer a frequência numa faixa escolhida. Em série com o campo AC aplicamos um campo DC, na amostra, com intensidades variáveis, podendo assumir os valores: 9, 18, 27, 36, 45, 54, 72 e 81 V/mm.

As alterações nos espectros foram arquivadas no microcomputador em forma de um banco de dados cada um com 500 pontos na faixa de 100 kHz a 400 kHz.

A análise feita nos espectros, revela que as alterações são bastante diferentes quando o cristal está na fase ferroelétrica ou paraelétrica, de maneira que na fase paraelétrica as alterações são de quebra de degenerescência, deslocamento nas frequências ressonantes e/ou mudanças de intensidades de alguns picos, porém os espectros mantêm suas características em cada campo aplicado. Na fase ferroelétrica, as alterações são drásticas, com mudanças qualitativas nos espectros de ressonâncias piezoelétricas da amostra, sugerindo que a mesma possa ter sofrido uma transição de fase. Estas alterações são irreversíveis e os espectros, mesmo depois de desligado o campo elétrico DC, não recuperam suas características originais.

Entendemos que o campo DC ao interagir com os dipolos existentes na fase ferroelétrica, provoquem mudanças de sítios dos respectivos íons.

## CRITICALIDADE AUTO ORGANIZADA EM OSCILAÇÕES PIEZOELÉTRICAS DO SAL DE ROCHELLE

E.F.Bezerra\*, N.M.Barbosa Neto\*, F.E.A.Melo\*, M.P. da Silva\*, P.T.C.Freire\*, I.G. da Silva\*, J.Mendes Filho\*

\* Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

+ Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

Palavras-Chaves: criticalidade, piezoeletricidade

O cristal de sal de Rochelle apresenta uma fase ferroelétrica entre as temperaturas de  $-18^{\circ}\text{C}$  e  $24^{\circ}\text{C}$ . Os dipolos elétricos na estrutura cristalina ferroelétrica podem ser pensados como um "ensemble" de osciladores piezoelétricos anarmônicos acoplados. Medidas de ressonâncias piezoelétricas mostraram que alguns modos piezoelétricos apresentam grandes não linearidades. Efeitos de geração de harmônicos e criticalidade auto organizada foram observados para algumas das frequências da força excitante. Para as frequências de 36,9 kHz, 53 kHz e 399 kHz da força excitante, foi encontrado que os espectros de amplitude dos relativos modos piezoelétricos obedecem a uma lei de escala do tipo  $1/f$ , com  $f$  igual a 1,1; 0,96 e 1,05, respectivamente.

## ON THE NATURE OF SUPER-NARROW LOW-FREQUENCY RESONANCES IN $\text{LiNbO}_3$ CRYSTALS

A. V. Ghiner, J. A. C. de Paiva, A. C. Hernandez\*, A. S. B. Sombra, E. Almeida and G. I. Surdutovich\*\*

Departamento de Física, UFC, Cx. P. 6030, Campus PICI, 60450-970, Fortaleza-CE

\* Instituto de Física de São Carlos, USP, 13560-970, São Carlos-SP

\*\* also with DSIF, FEE, Unicamp, Cx. P. 6101, 13083-970, Campinas-SP

Key-words :  $\text{LiNbO}_3$ , dielectric function.

Lithium niobate ( $\text{LiNbO}_3$ ) is a human-made dielectric crystal which is extensively used in electro-optics, nonlinear optics and acoustics, because of its unique physical proprieties. In the paper [1] was reported observation of super-narrow resonances of the complex dielectric function of  $\text{LiNbO}_3$  : Fe doped crystals at the frequencies of tens KHz. Such resonances were associated with probable clustering effects in doped crystals. Earlier similar narrow admittance resonance resonances in a lithium tantalate crystal were observed at much higher frequencies (tens MHz) and they were associated with the thickness-extensional and thickness-shear modes [2]. In this work we performed detailed study of the super-narrow resonances in Fe, Cu, Cr doped and pure  $\text{LiNbO}_3$  crystals and came to the following conclusions: a) resonances were observed both in doped and pure crystals; b) they are associated with twist oscillations of the sample plate; c) their frequencies  $\nu_n$  depend on the length (L) and thickness (h) of the plate. The resonant frequencies are determined by  $\nu_n = \frac{nV_{ph}}{L}$ , and phase velocity of the twist oscillations by  $V_{ph} \sim \sqrt{h\nu_n}$ . Therefore,  $\nu_n \sim h$ . This result was confirmed for the samples of a different composition and thickness.

[1] P. C. Barbosa, J. A. C. de Paiva et al, Phys. Stat. Sol. (a), 125, 723 (1991)

[2] K. Nakamura and H. Shimizu, Appl. Phys. Lett. 56, 1535 (1990).

(CNPq)

## VOLUME DE ATIVAÇÃO DA CONDUTIVIDADE PROTÔNICA EM $\text{SrCe}_{0.95}\text{Yb}_{0.05}\text{O}_{3-x}$

Ruth Hinrichs<sup>1</sup>, João Alziro Herz da Jornada<sup>2</sup> e Gerhard Tomandl<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Institut für Werkstoffwissenschaften Friedrich Alexander Universität Erlangen Nürnberg

<sup>2</sup> Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

<sup>3</sup> Institut für Keramische Werkstoffe - Bergakademie Freiberg

**Palavras-Chave:** condutividade protônica, pressão, espectroscopia de impedância

A tecnologia do hidrogênio oferece grande potencial para solução da demanda energética dos próximos decênios. Uma das maneiras mais eficazes de converter a energia química do hidrogênio em eletricidade é através de "fuel cells", que permitem a conversão eletroquímica de hidrogênio + oxigênio em água, sem a limitação de eficiência inerente ao ciclo termomecânico da queima de combustível em motores de explosão. Para construção de células eletroquímicas eficientes, são necessários condutores iônicos de alta velocidade, em que o espécime conduzido seja  $\text{O}^-$  ou  $\text{H}^+$ .

A descoberta de condutores protônicos desencadeou a busca por materiais com estabilidade química em atmosferas oxidantes e redutoras, estabilidade térmica e mecânica, propriedades de envelhecimento tais que sejam aplicáveis tecnologicamente.

Um dos critérios de aplicabilidade tecnológica de condutores protônicos é o mecanismo de condução, que deve ser tal, que não se estabeleçam gradientes químicos dentro do eletrólito sólido nem se estabeleça uma pressão de vapor nos eletrodos que implique em perda de veículo conduzido. Para determinar este mecanismo de condução, as propriedades elétricas de um material amplamente discutido como sendo um condutor protônico de grande potencial tecnológico do tipo *perovskita*, o óxido de estrôncio e cério dotado com 5at% de Itérbio, foi estudado com espectroscopia de impedância em função da pressão e da temperatura da amostra. A análise do comportamento da condutividade iônica em função dos parâmetros acima permitiu determinar o volume de ativação da condução e compreender melhor os mecanismos de translação protônica envolvidos neste processo.

## PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO FERROELÉTRICA DE FILMES CERÂMICOS ESPESSOS DE PLT.

Jair Baltazar-Rodrigues\* e José Antonio Eiras

Grupo de Cerâmicas Ferroelétricas - Depto de Física, Univ. Federal de São Carlos  
Rod. Washington Luis, Km 235 - 13565-905 São Carlos-SP. (016) 274-8227

\*Depto de Física, Univ. Estadual de Ponta Grossa - PR.

Palavras chave: Filmes cerâmicos, filmes espessos, filmes ferroelétricos

Filmes cerâmicos ferroelétricos têm revelado um grande potencial tecnológico e despertado grande interesse científico. Dispositivos baseados em propriedades piezoelétricas, piroelétricas e eletro-ópticas, características dessas composições, podem ser construídos e integrados à tecnologia de semicondutores, a partir da deposição desses filmes. Entre os vários óxidos ferroelétricos, o que mais mostrou-se apropriado para estas aplicações foram as composições a base de titanato de chumbo. Métodos físicos e químicos vem sendo utilizados para depositar-se esses filmes, onde depositam-se átomos diretamente sobre os substratos. Neste trabalho foi utilizado um método de co-precipitação química para produzir-se filmes cerâmicos espessos de titanato de chumbo com lantânio, onde se depositam partículas amorfas. Após a dispersão do material precipitado com agentes químicos orgânicos, para a adequação do meio à deposição, foram depositados vários filmes com concentrações diferentes de lantânio: 10%, 15% e 20%. Esses filmes foram depositados em substratos de lâminas de cromo/níquel, ficando com espessuras entre  $7\mu\text{m}$  e  $20\mu\text{m}$  após o tratamento térmico. O tratamento térmico foi realizado em dois estágios: o primeiro para eliminar os orgânicos e o segundo, em temperaturas mais altas, para a cristalização dos filmes. A cristalização em função da temperatura de tratamento térmico, foi monitorada através da análise de difração de raios-X. A caracterização elétrica foi realizada em filmes depositados sobre lâminas de cromo/níquel, porque estas lâminas funcionam como eletrodos, devido a condutividade delas manter-se alta mesmo após um tratamento térmico a altas temperaturas. Foi medida a constante dielétrica dos filmes feitos com todas as composições usadas, e a temperatura de transição de fase dos filmes com 20% de La, devido a esta composição ter a temperatura de transição mais baixa que as outras.

## RELAXAÇÃO DIELÉTRICA EM ULTRA-BAIXA FREQUÊNCIA EM MONOCRISTAIS FERROELÉTRICOS DE $\text{BaTiO}_3$ , $\text{LiTaO}_3$ e $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ .

*Jeremias Francisco de Araujo*

*Departamento de Física, Centro de Ciências da Natureza, Universidade Federal do Piauí*

*Josue Mendes Filho e Francisco Erivan Abreu Melo*

*Departamento de Física, Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará*

*Alaor S. Chaves e Fernando V. Letelier*

*Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais*

*Palavras-chave: Pico central, Relaxação, Susceptibilidade*

Monocristais de Titanato de Bário ( $\text{BaTiO}_3$ ) e Tantalato de Lítio ( $\text{LiTaO}_3$ ), experimentam uma transição de fase para-ferroelétrica para as temperaturas de  $135^\circ\text{C}$  e de  $618^\circ\text{C}$  respectivamente, enquanto que o monocristal de Tartarato de Sódio e Potássio tetra-hidratado ( $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ) conhecido como sal de Rochelle, exibe duas temperaturas críticas entre as quais o cristal se apresenta na fase ferroelétrica:  $-18^\circ\text{C}$  e  $24^\circ\text{C}$ . Neste trabalho medimos as partes real e imaginária da constante dielétricas destes materiais nas direções dos eixos ferroelétrico, em função de frequência dentro do intervalo de 2.8mHz a 100Hz, para várias temperaturas próximas da temperatura de transição de fase de cada material. Nossas medidas mostram a existência de um pico central, no valor da parte real da constante dielétrica para frequências entre 2.8mHz e 100Hz, para os cristais de  $\text{BaTiO}_3$  e Sal de Rochelle. No entanto o cristal de  $\text{LiTaO}_3$  exibe uma relaxação do tipo de Debye. Os nossos resultados experimentais revelam que a parte real da constante dielétrica é proporcional ao quadrado do coeficiente piroelétrico e ajustam muito bem com a previsão teórica feita por Chaves et al<sup>(1)</sup>, que mostra que a diferença entre a susceptibilidade isotérmica  $\chi^T$  e a susceptibilidade adiabática  $\chi^S$ , gera necessariamente a existência de uma dispersão de frequência em  $\chi(\omega)$  para frequências muito baixas para sistema ferroelétrico em banho térmico. A dispersão gera um pico de frequência zero, onde  $\chi(0)=\chi^T$ , que decai lentamente para  $\chi(\infty)=\chi^S$ , resultante da mudança contínua do regime isotérmico para o adiabático. Mostraremos também que em monocristais monodomínio de sal de Rochelle, nas vizinhanças de  $T=0^\circ\text{C}$ , onde o coeficiente piroelétrico é nulo, não exibe o pico central conforme proposto por Chaves et al<sup>(1)</sup>.

(1) Ultralow-frequency dispersion in macroscopic susceptibilities. A. S. Chaves, F. V. Letelier, J. F. Sampaio and R. Gazzinelli, Phys. Rev. B v 47, n° 8 . 4880, 1993.

## ANÁLISE DOS PROCESSOS TÉRMICOS NO CRESCIMENTO DE FIBRAS ÓXIDAS MONOCRISTALINAS PELO MÉTODO LASER HEATED PEDESTAL GROWTH

*Marcello Rubens Barsi Andreetta, Antonio Carlos Hernandez, José Pedro Andreetta*

Depto. de Física e Ciência dos Materiais, Inst. de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

**Palavras-chave:** crescimento de cristal, fibras óxidas, fusão a laser

Devido ao contínuo interesse no desenvolvimento de dispositivos eletroópticos e em aplicações de óptica não linear, que na maioria dos casos é um monocristal óxido e elemento ativo, pesquisadores da área de preparação de materiais têm buscado novos métodos para a obtenção de monocristais visando, principalmente, maior rapidez, versatilidade e baixo custo nos processos de preparação; porém mantendo a qualidade óptica e estrutural dos cristais semelhantes ou melhores que os métodos precedentes. Neste sentido, em 1992, o Grupo de Crescimento de Cristais se tornava o quarto laboratório no mundo a implantar a técnica de crescimento de fibras monocristalinas (FMC) óxidas por fusão a laser - LHPG. Neste trabalho, apresentaremos medidas do perfil de temperatura axial em crescimento de FMC de  $\text{LiNbO}_3$  para diversos diâmetros, assim como o gradiente de temperatura na interface sólido/líquido. Estas medidas foram obtidas de maneira direta com auxílio de um termopar de Pt-Pt10Rh de  $60\mu\text{m}$  de diâmetro, fixo no suporte da semente, e posicionado normal ao eixo de crescimento de forma que sua influência na medida fosse minimizada. Gradientes de temperatura da ordem de  $10^3 - 10^4$  °C/cm foram obtidos para diâmetros das FMC no intervalo de 400 a  $1200\mu\text{m}$  respectivamente. Conseqüências diretas destes elevados gradientes de temperatura são a auto-polarização dos domínios ferroelétricos no  $\text{LiNbO}_3$  durante o processo de crescimento, e velocidades de preparação 60 vezes superiores as técnicas de crescimento de cristais convencionais. Um estudo dos fluxos de calor existentes no processo de crescimento permitiu-nos descrever o comportamento axial do gradiente de temperatura na interface sólido/líquido em função do diâmetro da fibra. Baseado neste modelo, foi possível estabelecer um diâmetro crítico, acima do qual ocorrem trincas na FMC durante o crescimento. Para o  $\text{LiNbO}_3$  esse diâmetro crítico é de aproximadamente de  $900\mu\text{m}$ .

Agradecimentos: FAPESP, FINEP e CNPq.

## PROCESSO DE PRODUÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE $\text{LiF:F}_2^-$

*Wagner de Rossi, Izilda Márcia Raniéri, Fábio Eduardo da Costa, Nilson Dias Vieira Jr., Spero Penha Morato*

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

**Palavras-Chave:** centros de cor, absorvedor saturável,  $\text{LiF:F}_2^-$

Um método para a obtenção de cristais de  $\text{LiF:F}_2^-$  com boa qualidade para uso como absorvedor saturável ou elemento laser ativo foi desenvolvido. Estes cristais apresentam grande contraste entre a absorção saturável e a não saturável ( $\sim 15$  para  $\lambda=1,047\mu\text{m}$ ), com tempo de vida útil de muitos meses. O uso de um reator nuclear como fonte de radiação ionizante ( $\gamma$ ) possibilitou a obtenção de grandes concentrações dos centros de cor  $\text{F}_2^-$ , em tempos muito mais curtos que aqueles obtidos com fontes convencionais de  $^{60}\text{Co}$ . Verificou-se que, neste caso, a dose total deve ser fracionada e a amostra resfriada a  $\sim 0^\circ\text{C}$ , pois a alta intensidade de radiação leva a um aquecimento do cristal, que destrói parte dos centros  $\text{F}_2^-$ . O papel de certas impurezas no equilíbrio das reações de formação destes centros também foi estudado, e as conclusões mais importantes foram: Amostras ultra puras produzem uma quantidade pequena de centros  $\text{F}_2^-$  e a reação  $\text{F}_2^+ + \text{F}^- \rightarrow \text{F}_3^+$  é privilegiada em relação às reações  $\text{F}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{F}_2$ ;  $\text{F}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{F}_2^-$ . Impurezas de Na e K da ordem de  $\sim 0,2$  ppm, não são suficientes para influenciar de maneira perceptível a formação dos centros  $\text{F}_2^-$ . Altas concentrações de  $\text{OH}^-$  levam a uma quantidade muito grande de centros  $\text{F}_2^+$  estabilizados pela formação de  $\text{O}^{2-}$ , o que prejudica a formação dos centros  $\text{F}_2^-$ . Impurezas de Mg minimizam o problema, pois ao se ligarem ao  $\text{OH}^-$  evitam que estes capturem elétrons. Descobriu-se também, que a irradiação por pulsos de laser de rubi, diminui as perdas residuais. Esta irradiação destrói parte dos centros  $\text{F}_3^-$  e transforma os centros  $\text{F}_2$  em centros  $\text{F}_2^+$  levando a um posterior consumo de  $\text{F}_3^-$ . A diminuição da perda não saturável esta, portanto, relacionada à destruição de centros  $\text{F}_2^-$  perturbados que surgem para altas concentrações de  $\text{F}_2^-$ .

(PADCT/CNPq)

## PERFIL DE CONCENTRAÇÃO DE Te EM CRISTAIS DE $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ e $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$

Maria Cláudia Cerchiari Custódio<sup>+</sup>; Antonio Carlos Hernandez<sup>\*\*</sup> e José Pedro Andreetta<sup>++</sup>

<sup>+</sup>Instituto de Física, Universidade de São Paulo; <sup>\*\*</sup> Depto de Física e Ciência dos Materiais, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** crescimento de cristal; materiais termoelétricos; teluretos

Materiais semicondutores V-VI, formados a partir de  $(\text{Bi}, \text{Sb})_V - (\text{Te}, \text{Se})_{\text{VI}}$ , são utilizados em dispositivos termoelétricos devido à baixa condutividade térmica e altos coeficiente Seebeck e condutividade elétrica. Ligas a partir de compostos binários, como  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  e  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  (o diagrama pseudo-binário é lenticular, portanto os compostos são solúveis entre si, sobre toda a faixa de concentração) revelaram-se altamente eficientes pois a introdução de um composto na matriz do outro, provoca distorções de curto alcance, na estrutura cristalina, aumentando o espalhamento de fônons e conseqüentemente diminuindo a condutividade térmica. A distribuição de Te, por exemplo, pode alterar o tipo de condutividade e modifica sensivelmente a eficiência dos materiais. Assim sendo, condições de preparação adequadas e obtenção de cristais de composição química controlada são fundamentais. Preparamos, utilizando a técnica de Bridgman, alguns cristais de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , de  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , e ligas de  $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$  com fração molar variável. Utilizando a técnica de EPMA, efetuamos medidas axiais da composição química para os cristais de telureto de bismuto, e mapeamento da composição sobre superfícies nos cristais de telureto de antimônio e nas ligas. Os teluretos de bismuto tipo-p, que foram preparados com composição próxima ao ponto de estequiometria, apresentaram perfil axialmente uniforme. Os cristais de telureto de bismuto tipo-n, cuja composição da fase líquida foi colocada distante do ponto de estequiometria, apresentaram uma região de composição uniforme e uma região final de composição eutética com estrutura lamelar. A análise de composição pontual matricial realizada na superfície de um cristal de telureto de antimônio, revelou material razoavelmente uniforme mas com diminuição da quantidade de telúrio na região final. Em algumas amostras de telureto de bismuto, foram medidos os parâmetros termoelétricos e a eficiência obtida para estes materiais é comparável aos valores de literatura.

(FINEP, CAPES)

## DEFORMAÇÃO ELÁSTICA E FRATURAS EM MONOCRISTAIS $\text{Li}_3\text{ThF}_7$

J.-Y. Gesland<sup>#</sup> e R. L. Moreira<sup>\*</sup>

<sup>#</sup>Université du Maine, Cristallogénese, 72017 - Le Mans - França

<sup>\*</sup> Depto. de Física, ICEX, UFMG, C.P. 702, 30161.970 Belo Horizonte (MG) Brasil

**Palavras Chave:** crescimento cristalino, deformação elástica, transição de fase

Monocristais de  $\text{Li}_3\text{ThF}_7$  de grandes dimensões estão sendo elaborados pela técnica de Czochralski. Estes cristais são os únicos materiais inorgânicos capazes de constituírem monocromadores de raios-X na região de 6.5 Å. No entanto, logo após seu crescimento, aparecem inúmeras micro-fraturas, com um padrão bem ordenado, independentemente da taxa de resfriamento utilizada no retorno à temperatura ambiente. Estas fraturas não impedem sua utilização tecnológica, mas fragilizam o cristal e impedem seu corte (em forma de lâminas, para as devidas aplicações) abaixo de uma espessura de cerca de 1 mm. Em trabalhos precedentes, mostramos que este cristal apresenta uma transição de fase tetragonal-ortorrômbica, por volta de 96°C. Esta transição seria provavelmente responsável pelas fraturas do material. Com o intuito de compreendermos a origem destas fraturas, nós iniciamos estudos por difração de raios-X e microscopia óptica do material, no intervalo de temperatura em torno desta transição (entre 30 e 200°C). Nossos dados mostram o estabelecimento de uma deformação elástica no plano ab do cristal, abaixo de 100°C, acompanhada da rotação da célula unitária de um ângulo de 45° e do aparecimento de domínios a 90°. Estes resultados explicam o padrão de micro-fraturas a partir da má acomodação entre os parâmetros das duas fases. A partir desta análise, pudemos propor puxamentos em diferentes direções cristalográficas ou com pequenas dopagens de Na, que se mostraram eficazes numa melhor acomodação dos parâmetros na frente de transição, com conseqüente redução e até eliminação das micro-fraturas.

## GROWTH OF SINGLE CRYSTAL FIBERS OF RUTHENATES AND TITANATES BY LHPG

*D.Reyes Ardila, M.R.B. Andreetta, S.L. Cuffini, A.C. Hernandez, J.P. Andreetta and Y.P. Mascarenhas.*

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, C.P. 369, 13560-970,SP,Brasil

**Palabras-Chave:** single-crystal fiber, ruthenates, titanates.

Laser Heated Pedestal Growth (LHPG) has proved its versatility in the last ten years by growing single crystal fiber with low and very high melting points materials and also congruently and incongruently melting compounds. However, if a melt evaporates incongruently, crystal will be more difficult to growth. In this work, we report the single crystal fiber growth of  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  (for the first time using LHPG),  $\text{SrTiO}_3$  and the characterization by SEM, EPMA and X-ray diffraction using Laue method and single crystal diffractometer (CAD-4, Enraf Nonius).  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  was reported in 1994 as the first non-cuprate layered perovskite that is superconducting near 1 K. Although its  $T_c$  is so low, this layered oxide is the first directly relevant superconductor, without copper, for comparison with the high- $T_c$  cuprates. Besides, this material presents incongruently evaporation of Ru. The best conditions of the source rod composition (with Ru excess) and growing rates were obtained and high quality single crystal fibers up to 30 mm in length with 0.8-1.0 mm in diameter were grown.  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  single crystal fiber are easily cleaved. The Laue pattern indicated that the cleaved plane is (001) and the 4-fold symmetry axis is perpendicular to the growth direction of the fiber. Crystallographic parameters were determined (space group:  $I4/mmm$  and cell parameters:  $a=3.863(1)\text{\AA}$ ,  $c=12.734(1)\text{\AA}$ ). The fiber were analyzed by SEM and EPMA which permitted to confirmed the absence of any type of inclusions and the Sr:Ru stoichiometry equal to 2:1 in the transversal and longitudinal direction. As the most of titanates,  $\text{SrTiO}_3$  presents a high melting point (2050 °C) and in this case also an important oxygen loss at high temperature. Therefore, the conditions of the source rod preparation, as reagent composition, temperature treatment and geometry, affect notably the quality of the single crystal fiber. The best results were obtained using circular cross section rods obtained by extrusion process of  $\text{SrCO}_3$  and  $\text{TiO}_2$ . The single crystal fibers were transparent and colorless to the eye, without any cracks or inclusions. In this way, we show how to deal with two different type of materials in order to obtain a high quality single crystal fiber using LHPG.  
( FAPESP, CAPES, CNPq AND FINEP )

## EVOLUÇÃO ESTRUTURAL DE XEROGÉIS MONOLÍTICOS DE $\text{SnO}_2$ EM CONDIÇÕES ISOTÉRMICAS

*Giancarlo Espósito de S. Brito<sup>(1)</sup>, Sandra H. Pulcinelli<sup>(1)</sup>, Celso Santilli<sup>(1)</sup>,  
Aldo Felix Craievich<sup>(2,3)</sup>*

<sup>(1)</sup>Instituto de Química - UNESP - Araraquara, SP

<sup>(2)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq

<sup>(3)</sup>Instituto de Física, USP - São Paulo, SP

**Palavras-Chave:** xerogéis,  $\text{SrO}_2$ , SAXS

Pós compactados de  $\text{SnO}_2$ , obtidos pelo processo sol-gel, apresentam poros intra e inter-agregados resultando em uma distribuição bimodal. Medidas de SAXS in-situ mostraram que a cinética de crescimento dos intra-poros, durante o tratamento isotérmico, possui propriedades de escala dinâmica<sup>(1)</sup>. Entretanto, não foi possível analisar a evolução dos poros inter-agregados devido à escala de tamanho reduzida envolvida nas experiências de SAXS. Para contornar esse problema desenvolvemos uma metodologia de preparação de camadas espessas monolíticas de  $\text{SnO}_2$  contendo poros de dimensões que podem ser caracterizadas por SAXS. As medidas foram efetuadas in-situ durante o tratamento isotérmico a 300, 400 e 500°C, empregando radiação síncrotron ( $\lambda = 1.60\text{\AA}$ ). As curvas de SAXS das amostras secas a 110°C apresentam um único pico relacionado à distribuição monomodal de tamanho dos poros inter-agregados. Durante o tratamento a 300°C verificou-se o aparecimento de um segundo pico atribuído aos poros intra-agregados. Com o prolongamento do tratamento isotérmico a 300°C a intensidade dos máximos dos picos aumenta, enquanto a distância de correlação referente ao máximo permanece constante. Esse comportamento é típico do estágio inicial de formação de poros, que deve resultar da perda de água estrutural do xerogel. Para temperatura superiores, a posição dos picos desloca-se continuamente para a região de pequenos valores de  $q$  e a intensidade dos máximos aumenta. A análise da evolução temporal da função de estrutura mostra que as duas famílias de poros exibem um mecanismo de crescimento com propriedade de escala dinâmica. O mecanismo de crescimento neste estágio é controlado pela coagulação entre os poros intra e inter-agregados.

(1) C. V. Santilli, S.H. Pulcinelli, A. F. Craievich, Phys. Rev. B51(14) (1995) 8801.

## MÉTODOS DE SUBSTITUIÇÃO DE OH NA ESTRUTURA DE AEROGÉIS DE SÍLICA DURANTE A PREPARAÇÃO.

*Júlio César Ferreira Leal, Adão Antônio da Silva*

Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - MS

*Palavras-chave:* sol-gel, aerogel de sílica, caracterização

Neste tempo de elevação de custos, fontes limitadas de energia e no aumento da necessidade de comunicação, o desenvolvimento de novas fontes e de sistemas que reduzem os gastos são de extrema necessidade.

Com o passar dos anos, os vidros se tornaram de grande importância em áreas como a óptica, sendo utilizados em medicina, telecomunicações (fibras ópticas), amplificadores ópticos, lasers, sensores térmicos, etc.

Atualmente um dos aspectos mais importantes do processo SOL-GEL é o fato de não haver necessidade de altas temperaturas para a preparação de vidros, utilizados como pré-formas, para fabricação de fibras ópticas, deixando assim o seu custo de produção consideravelmente mais barato.

A maior dificuldade encontrada na produção de fibras ópticas a partir de vidros de sílica é o fato da permanência de OH<sup>-</sup> nas pré-formas utilizadas no puxamento das fibras. Isto faz com que seja necessária a utilização de diversas técnicas especiais na produção destas pré-formas, encarecendo assim o seu custo final.

Pesquisamos atualmente a preparação de aerogéis de sílica livres de OH<sup>-</sup> e H<sub>2</sub>O que ficam na estrutura e superfície, substituindo-os por cloro no momento de sua preparação.

O interesse pelo estudo do processo proposto, da substituição dos radicais H<sub>2</sub>O e OH<sup>-</sup> por cloro, na estrutura do aerogel de sílica, é o fato do cloro ser eliminado da estrutura do aerogel, a temperaturas de 800<sup>o</sup> a 1000<sup>o</sup> C com maior facilidade do que estes radicais.

(CECITEC/UFMS)

## AN X-RAY TOPOGRAPHY STUDY OF DENDRITIC WEB SILICON GROWTH PROCESS

S.L. MORELHÃO\*, D.L. MEIER†, G.T. NEUGEBAUER‡,  
B.B. BATHEY†, AND S. MAHAJAN\*\*

\*Laboratório Nacional de Luz Sincrotron / LNLS, Campinas - SP

\*\*Dept. of MS&E, Carnegie Mellon University, Pittsburgh PA 15213, USA

‡EBARA Solar, Inc., Large PA 15025, USA

The dendritic web growth technique is an elegant method for growing very thin (~100µm) ribbons of crystalline silicon. Its rectangular shape and as-grown mirror-like surfaces (which eliminates the need for sawing and polishing) make it nearly ideal for manufacturing solar cells at low cost. The photovoltaic conversion efficiency archived with dendritic web silicon (DWS) solar cells has also attracted industrial interest. High efficiencies approaching 17% have been obtained with web cells. Due to thermal stresses characteristic in the DWS growth process, dislocations and residual stresses are observed in most ribbons. In this study, transmission X-ray topography was used for analyzing dislocation networks in as-grown web silicon. We were able to correlate minority carrier diffusion length with the configuration of the networks that are strongly affected by twin planes lying midway across the web thickness. The effects of the twins onto mechanical properties of web crystals are also discussed here. Furthermore, analysis of the networks is useful for thermal stress modeling since it can provide information regarding the thermal stress field associated with a given growth environment.

## MAGNETO-OPTICAL PROPERTIES IN GaAs/InGaAs/AlGaAs MODULATION DOPED QUANTUM WELLS

F. Iikawa<sup>1</sup>, M. L. F. Abbade<sup>1</sup>, R. G. Pereira<sup>1</sup>, J. A. Brum<sup>1</sup>, A.A. Bermuss<sup>2</sup>, A.L. Gobbi<sup>2</sup>,  
and G. Borghs<sup>3</sup>

<sup>1</sup>IFGW-Unicamp, CEP-13083.970, Campinas, SP, Brazil

<sup>2</sup>CPqD-Telebras, CEP-13088-061, Campinas, SP, Brazil

<sup>3</sup>IMEC, Kapeldreef 75, B-3001, Leuven, Belgium

*Palavras-Chave:* 2D-electron gas, magneto-luminescence, Fermi-edge singularity

Magneto-optical properties of highly modulation doped GaAs/In<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As/Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As single quantum wells are strongly affected by two-dimensional electron density ( $N_{2D}$ ). A hydrogen passivation technique was used to modify the electron gas density in these structures. The main advantage of this procedure is to control the electron density in the same sample. Two different situations were analyzed: an as-grown sample ( $N_{2D}=2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ), with the second subband slightly occupied, and a H-passivated sample ( $N_{2D}=1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ), with Fermi level far from the second subband.

Low temperature (2K) luminescence spectra of these structures, for magnetic fields (0-13T) applied perpendicular to the 2D electron plane, exhibit several peaks due to Landau level transitions. The remarkable feature observed in magneto-luminescence spectra is the oscillation of the peak intensity at the Fermi energy. This oscillatory behavior is quite distinct for each sample analyzed here. Hydrogen-passivated sample exhibits a continuous decrease in intensity as the Landau level empties. In contrast, the as-grown sample shows a peak intensity enhancement at the even filling factor. Additionally, we observed well defined resonant magneto-polaron effects. The magneto-polaron anti-crossing splitting is strongly screened by the presence of 2D electron gas.

(FAPESP, FINEP, CNPq-PADCT)

## RESSONÂNCIA CICLOTRÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS DE In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As E SUPERREDES DE (InAs)<sub>n</sub>(GaAs)<sub>m</sub>

L.A.Cury<sup>\*</sup>, J.Beerens<sup>†</sup>, F.M.Matinaga<sup>\*</sup>, S.L.S.Freire<sup>\*</sup>, M.A.Py<sup>‡</sup>, M.V.B. Moreira<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas - Universidade Federal de Minas Gerais,  
Caixa Postal 702, 30161-970 Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil

<sup>‡</sup> Département de Physique - Faculté des Sciences - Université de Sherbrooke  
2R1 J1K Sherbrooke, Québec, Canada

<sup>†</sup> Institute for Micro- and Optoelectronics, Swiss Federal Institute of Technology,  
CH - 1015, Lausanne, Switzerland

*Palavras-chave:* ressonância ciclotrônica, massa efetiva, não-parabolicidade

Heteroestruturas de transistores de efeito de campo com canais de poços quânticos (QW) de In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As e de superredes (SL) de (InAs)<sub>n</sub>(GaAs)<sub>m</sub>, assimétricas e com dopagem modulada, tem sido investigadas por ressonância ciclotrônica (RC) e fotoluminescência (PL). As medidas de absorção na RC foram feitas a 4.3K utilizando-se comprimentos de onda de 96,5 μm, 118,9 μm e 163,0 μm. Nítidas oscilações, previstas por Ando, são observadas em nossos espectros de RC. A partir delas obtemos a concentração de elétrons bidimensional nos canais e também o fator de preenchimento  $\nu$  que são essenciais para a análise quantitativa dos dados e obtenção das massas efetivas nas duas séries de amostras estudadas. Uma vez que as ressonâncias ciclotrônicas envolvem estados eletrônicos próximos da energia de Fermi, a qual é relativamente alta em nossas amostras, efeitos importantes de não-parabolicidade são considerados na energia dos níveis de Landau resultando em uma expressão para a massa  $m(Z)$  dos elétrons, dentro do canal, em função da direção de crescimento. Em nosso modelo nós primeiro determinamos a função de onda  $\Psi(Z)$  usando um método auto-consistente. A massa efetiva para a energia de Fermi é então determinada integrando-se  $\Psi(Z)^2/m^*(Z)$  sobre toda a estrutura. Nossos resultados mostram um aumento significativo na massa efetiva dos elétrons em heteroestruturas quando comparados com os obtidos para In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As massivo (*Bulk*), já existentes. Esse aumento é ainda maior nas heteroestruturas com canal do tipo SL.

CNPq

## Fotoluminescência de um Gás de Elétrons no Regime do Efeito Hall Quântico

*Flávio Plentz and Donald Heiman*

*MIT Francis Bitter National Magnet Lab., Cambridge, MA 02139*

*Aron Pinczuk, Loren N. Pfeiffer and K.W. West*

*AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974*

*palavras chave:* efeito Hall quântico, fotoluminescência, separação elétron-buraco

Um dos fenômenos mais notáveis em física da matéria condensada é o efeito Hall quântico. O parâmetro fundamental na determinação do comportamento de um sistema eletrônico bi-dimensional (2DES) altamente correlacionado na presença de um campo magnético intenso, e estudado por meio de espectroscopia ótica, é a separação entre os elétrons e os buracos fotoexcitados, em unidades do raio da órbita de ciclotron,  $d/l_0$ . Apresentamos resultados de medidas de fotoluminescência (PL) de alta resolução em baixa temperatura ( $0,5 \text{ K} < T < 4.2 \text{ K}$ ), bem como de PL resolvida no tempo, em amostras de alta mobilidade ( $\sim 4 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ) contendo um 2DES no regime do efeito Hall Quântico inteiro (IQHE) e fracionário (FQHE). Mostramos, por meio de PL resolvida no tempo, que  $d/l_0$  pode ser controlado tanto pela variação da densidade do 2DES por meio de um "gate" frontal como por um campo elétrico aplicado através do poço quântico utilizando-se um "gate" trazeiro. Apresentamos estudos inéditos de PL no regime de IQHE e FQHE em função de  $d/l_0$ . Para o fator de preenchimento  $\nu=1$  observamos novas anomalias óticas, fortemente dependentes da separação e-h. Observamos a formação brusca de uma nova transição em baixa energia sendo que uma estrutura de multipletto pode desenvolver-se. Apresentamos resultados da dependência do espectro de PL em função de  $d/l_0$  para  $\nu \ll 1$  onde se forma um novo dubleto. Mostramos que as características deste dubleto, especialmente a dependência da separação entre as componentes e o desvio energético da componentes de mais alta energia em  $\nu=1/3$ , estão essencialmente relacionadas a  $d/l_0$ . Os fenômenos observados estão relacionados à mudança na resposta de blindagem e na polarizabilidade do 2DES quando o nível de Fermi cruza a região de estados localizados no IQHE ou quando o 2DES se condensa formando um fluido quântico incompressível no FQHE.

## MAGNETO-EXCITON LOCALIZATION AT INTERFACE ROUGHNESS IN QUANTUM WELLS AND QUANTUM WIRES

*A. L. C. Triques<sup>1</sup>, M. J. S. P. Brasil<sup>1</sup>, I. R. Favotto<sup>1</sup>, M. V. Marquezini<sup>1</sup>, A. A. Bermussi<sup>2</sup> I. F. Costa<sup>1</sup>, J.A. Brum<sup>1</sup>, M. A. Cotta<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, UNICAMP, 13083-970 Campinas, SP

<sup>2</sup>CPqD, TELEBRAS, 13088-061 Campinas, SP

*Palavras-Chave:* low-dimensional structures, interfaces, magneto-exciton

Most of the quantum-wires structures grown up to now with different techniques show some indication that interface roughness influences their optical properties, such as a broad luminescence emission and a non-negligible Stokes shift. Interface roughness gives rise to exciton localization and may hamper the evidence of exciton confinement. Nevertheless, localization effects have so far been neglected in the analyses when inferring exciton confinement from experimental data. We investigate the interface roughness localization in an InGaAs/InP structure presenting a quantum-well-like (QW) and a quantum-wire-like (QWW) state. The QWW state is formed at an InGaAs layer grown at the steeper side of a saw-toothed-like InP surface. We use magneto-optics to probe the exciton localization and confinement, varying the temperature and the angle of the external magnetic field relative to the sample. The angle dependence of the magneto shifts from the emission lines corresponding to the QW and QWW states is analyzed considering the special geometry of our structure. This analysis unambiguously demonstrates the existence of lateral confinement for the QWW state. Temperature dependent results show that interface localization plays a significant role in the measured exciton magneto-shifts, for both the QW and QWW states. As we increase the temperature, the ratio between free and interface-localized excitons increases and the magneto-shifts increase, reflecting a decrease of the interface-localization component. From the comparison between our results and calculations of the magneto-exciton in the presence of interface defects, we are able to clearly distinguish the exciton localization due to interface roughness from lateral confinement and to describe the degree of localization by effective parameters.

(FAPESP, CNPq-PADCT, FINEP)

## MAGNETOLUMINESCENCE SPECTRA ASSOCIATED TO ACCEPTORS IN GaAs-(GaAl)As SUPERLATTICES.

Andrea Latgé<sup>1</sup>, N. Porrás-Montenegro<sup>2</sup>, M. de Dios-Leyva<sup>3</sup>, and Luiz E. Oliveira<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Inst. de Física, Universidade Federal Fluminense, CP 100093, 24001-970 Niterói-RJ, Brasil

<sup>2</sup> Depto. de Física, Universidade del Valle, A.A. 25360, Cali, Colombia

<sup>3</sup> Depto. de Física, Universidade de Havana, San Lazaro y L. Vedado, 10400, Havana, Cuba

<sup>4</sup> Inst. de Física, Universidade Estadual de Campinas, CP 6165, Campinas -SP, Brasil

*Key words:* magnetoluminescence, superlattices, impurities

The acceptor-related photoluminescence spectra of a GaAs-(Ga,Al)As superlattice, under the influence of a magnetic field applied parallel to the interfaces, are studied following a variational procedure within the effective-mass approximation. Previous theoretical work<sup>1</sup> and magnetoluminescence experiments<sup>2</sup> involving acceptors have motivated the present theoretical study. Electron magnetic Landau levels and envelope wave functions were obtained by an expansion in terms of sine functions, whereas for the impurity levels the envelope functions were taken as product of sine and hydrogenic-like variational functions. Impurity binding energies and wave functions are obtained for acceptors at a general position in the superlattice. The magnetoluminescence spectra associated to acceptors are calculated for homogeneous, on-center and near on-edge spike doped distributions of impurities in the GaAs regions of the superlattice. The magnetic-field dependence of the photoluminescence spectra of conduction miniband-to-acceptor transitions for different temperatures and values of the superlattice period is investigated. The theoretical results are in good agreement with available magnetoluminescence measurements<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> A. Latgé, N. Porrás-Montenegro, and L. E. Oliveira, Phys. Rev. B 51, 13344 (1995).

<sup>2</sup> B. J. Skromme, R. Bhat, M. A. Koza, S. A. Scharz, T. S. Ravi, and D. M. Hwang, Phys. Rev. Lett. 65, 2050 (1990); P. M. Barmby, J. L. Dunn, and C. A. Bates, J. of Phys.: Condens. Matter 7, 9799 (1995).

## CHARGED EXCITONS IN II-VI MODULATION-DOPED QUANTUM WELLS

V. A. Chitta

Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, Brazil

A. Haury, A. Arnoult, J. Cibert, Y. Merle d'Aubigné, S. Tatarenko, and A. Wasiela

Laboratoire de Spectrometrie Physique, Université Joseph Fourier, Grenoble, France

*Keywords:* charged excitons, quantum wells, II-VI semiconductors

Recently, charged excitons ( $X^-$ , two electrons bound to one hole and  $X^+$ , two holes and one electron) have been found to be a characteristic feature of a low density two-dimensional carrier gas. II-VI quantum wells (QWs) are particularly favorable to investigate these excitonic complexes due to the quite large exciton binding energies, and the possibility to use transparent substrates which allow quantitative transmission measurements.

Samples with five identical CdTe quantum wells (8 nm thick) separated by nitrogen-doped (or undoped)  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x = 0.25$ ,  $y = 0.08$ ) barriers have been grown by molecular beam epitaxy. The doped regions and the nitrogen concentration have been varied. Capacitance-voltage profiles confirm the nitrogen localization in the barriers, and the confinement of holes into the quantum wells.

The undoped sample exhibits the free exciton  $X$  and, due to the residual n-type doping, the negatively charged exciton  $X^-$ . In the remotely p-doped QWs we observe both  $X$  and  $X^+$  excitons in photoluminescence and transmission spectra. The charged excitons are identified, in the low temperature transmission spectra, by their optical polarization, when a magnetic field is applied parallel to the growth direction. From the thermal variation of the  $X$  and  $X^+$  polarization rates, we deduce the Landé factor of electrons ( $g = -1.6$ ) and heavy-holes ( $g = -0.4$ ), respectively, in the CdTe QWs. The binding energy of the  $X^-$  and  $X^+$  excitons are very close to each other (3 meV) and considerably smaller than the localization energy of the exciton on the neutral acceptor (9 meV for nitrogen at the center of CdTe/CdZnTe QWs).

For higher carrier densities, at zero magnetic field, band-to-band transitions are observed and characterized by a Fermi-edge singularity and a Moss-Burstein shift. Applying a magnetic field, the metal to insulator transition can be reached, which is characterized by the reappearance of the  $X^+$  exciton.

(CAPES)

## QUANTUM INTERFERENCE EFFECTS IN A STRONGLY FLUCTUATING MAGNETIC FIELD.

G.M. Gusev,<sup>1</sup> U. Gennser,<sup>2</sup> X. Kleber,<sup>2</sup> D.K. Maude,<sup>2</sup> J.C. Portal,<sup>2</sup> D.I. Lubyshv,<sup>1</sup>  
P. Basmaji,<sup>1</sup> M. P.A.da Silva,<sup>1</sup> J.C. Rossi,<sup>3</sup> and Yu.V. Nastaushev.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física de São Carlos, 13560-970, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

<sup>2</sup>CNRS-LCMI, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

<sup>3</sup>Universidade Federal de São Carlos, Brazil

**Keywords :** Universal conductance fluctuations, quantum interference

The localisation and quantum interference problems for a two-dimensional electron gas (2DEG) experiencing a random magnetic field has recently attracted considerable interest. The motivation stems from the theoretical prediction, that in the regime of the fractional quantum Hall effect, at filling factor  $1/2$ , composite fermion quasi-particles move in a static random effective magnetic field. We have studied the negative magnetoresistance and universal conductance fluctuations due to quantum interference in a two-dimensional electron gas (2DEG) grown on substrates with pre-patterned, sub-micron dimples. Since the 2DEG is sensitive only to the normal component of  $B$ , electrons will move in a spatially inhomogeneous ( $B$  perpendicular to the substrate -  $B_{\perp}$ ) or sign-alternating random magnetic field ( $B$  parallel to the substrate -  $B_{\parallel}$ ). We demonstrate, that in a random magnetic field only second order corrections to the magnetic flux change through the closed loops formed by the electrons paths are of importance for a quantum interference effects. Correlation properties of the universal conductance fluctuations were studied as a function of temperature, magnetic field and angle between  $B$  and the substrate. The amplitude of the conductance fluctuations in a parallel external magnetic field is found to be 1.5 - 2 times smaller than for  $B_{\perp}$ .

(CNPq and FAPESP)

## RELAXAÇÃO DO SPIN DE PORTADORES FOTO-EXCITADOS EM HETERO-ESTRUTURAS DOPADAS DE GaAs.

M. Z. Maialle<sup>(a)</sup> e M. H. Degani<sup>(b)</sup>

(a) Departamento de Física e Física Aplicada. Universidade São Francisco. Itatiba - SP

(b) Instituto de Física de São Carlos. Universidade de São Paulo. São Carlos - SP

*Palavras-Chaves:* spin, relaxação, hetero-estrutura

Neste trabalho, introduzimos um modelo teórico original incorporando simultaneamente dois importantes mecanismos de relaxação do spin dos buracos (elétrons) foto-excitados em amostras dopadas *tipo n* (*tipo p*). Nosso cálculo dos níveis de energias das estruturas investidas é auto-consistente, usando o método do "Split-off Operator" aplicado a semicondutores [1]. A mistura de spin na banda de valência é calculada expandindo-se os estados dos buracos em termos de seus estados em  $k_{\parallel} = 0$  (os quais têm spins puros) e diagonalizando a hamiltoniana efetiva [2]. Isto nos fornece a base para descrever a relaxação de spin na banda de valência devida ao espalhamento dos buracos. O segundo mecanismo em nossa teoria é a interação de troca (*exchange*) entre o elétron e o buraco, capaz de mudar o spin dos portadores, como inicialmente descrito por Bir, Aronov e Pikus (processo BAP) [3] para o bulk. Mostramos, neste trabalho, como este processo se aplica à estruturas bidimensionais, e como a inclusão simultânea de estados de valência com mistura de spins contribui para reforçar a relaxação do spin. Dependências com os diferentes tipos de perfis de heteroestruturas são analisadas, já que eles afetam os níveis de energias e a intensidade da interação de exchange. Variando outros parâmetros, tais com a densidade de portadores oriundas da dopagem e a energia de excitação, observamos diferenças na relaxação de spin devido à mudanças no processo de espalhamento.

Referências: [1] M. H. Degani, Phys. Rev. B 44, 5580 (1991).

[2] D. Broido and L. J. Sham, Phys. Rev. B 31, 888 (1985).

[3] G.L. Bir *et al.*, Sov. Phys.-JETP 42, 705 (1976).

<sup>(a)</sup>Instituto de Pesquisa, Pós-Graduação e Extensão Acadêmica, IPPEX - USF

## TRANSPORTE DISPERSIVO EM POLIANILINAS DOPADAS

*Sérgio Mergulhão*

Departamento de Física/UFSCar/São Carlos-SP

*Guilherme F. Leal Ferreira & Roberto M. Faria*

DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP

**Palavras-chave:** polianilina, transporte dispersivo, tempo de voo.

A técnica de tempo de voo é uma ferramenta poderosa no estudo de propriedades de transporte de elétrons e de buracos em diferentes materiais não-condutores. Através dela é possível determinar a mobilidade dos portadores e identificar o processo de transporte relativo à sua dispersividade. O método consiste basicamente na medida da evolução da corrente elétrica no tempo, devido a elétrons ou buracos gerados numa superfície do material por meio de um pulso de luz de curta duração, que são arrastados até a outra superfície da amostra pela aplicação de um campo elétrico externo. O eletrodo que recebe o pulso de luz é de material transparente, e o portador que atravessa a amostra é definido pelo sinal do campo aplicado. Em nossas medidas foram usadas amostras de polianilina (PANI), moderadamente dopadas em solução de HCl, e o campo aplicado variou de 1 a 500 kV/cm. Os transientes de corrente para os diferentes valores de campo elétrico foram lançados em gráficos log-log, e mostraram um comportamento característico de processos de transporte dispersivo, com corrente proporcional a  $t^{-(1-\alpha)}$  para tempo menores que um tempo característico  $\tau$ , que é identificado como o tempo de trânsito dos portadores, e proporcional a  $t^{-(1+\alpha)}$  para  $t > \tau$ . O parâmetro  $\alpha$  é uma característica dos materiais que determina o grau de dispersividade do processo de condução, e fica entre 0 e 1. A dependência observada do tempo de trânsito com o campo elétrico nos filmes de polianilinas moderadamente dopados reforça a evidência de que esse material apresenta um transporte dispersivo.

## Estudo Conformacional de Politiofenos Substituídos

*J. Bohland Filho e M.C. dos Santos*

Instituto de Física, UNICAMP, 13081-970 Campinas SP

**Palavras-chave:** termocromismo, conformação de cadeia, regioregularidade

A síntese e a caracterização de politiofenos substituídos regioregulares foram reportadas recentemente na literatura. Em alguns desses novos materiais uma verdadeira transição de fase termocrômica foi observada, enquanto que em outros, embora ocorra o termocromismo, as modificações da estrutura eletrônica induzidas pela temperatura são contínuas. Esse é um resultado surpreendente, tendo em vista a expectativa de que polímeros regioregulares deveriam ter estrutura bem definida. Nesse trabalho investigamos as propriedades eletrônicas e conformacionais de politiofenos substituídos lateralmente por alquilas e éteres, em função da posição de substituição. Cálculos semi-empíricos a nível MNDO foram realizados para o estudo conformacional de oligômeros, e a estrutura eletrônica dos polímeros foi obtida através do método de pseudo-potencial VEH. Foram obtidas curvas para o potencial de torção dos anéis de tiofeno em relação ao plano de conjugação. Uma simulação do empacotamento das cadeias foi realizada. Nossos resultados mostraram que as diferentes posições de substituição determinam potenciais de torção distintos e que, mesmo sendo regioregulares, alguns materiais são desordenados devido à interação repulsiva entre um anel e o substituinte do anel vizinho, destruindo assim a transição de fase termocrômica.

(CNPq, CAPES, FAPESP e FINEP)

## ELABORAÇÃO DE FLUIDOS MAGNÉTICOS BIOCOMPATÍVEIS

Francisco Augusto Tourinho<sup>1</sup>, Paulo César de Morais<sup>2</sup> e Marcelo Henrique Sousa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>2</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: biofluidos, biocompatibilidade, fluidos magnéticos*

Os fluidos magnéticos, por suas características de um sistema coloidal associadas ao magnetismo dos sólidos, representam hoje um importante precursor para inúmeras aplicações em tecnologias de ponta. Não obstante, o seu emprego em aplicações biomédicas é recente e rico de promessas. Por um lado, a sua natureza coloidal (nanopartículas "suspensas" num líquido carreador) nos permite visualizar a possibilidade de uma biocompatibilidade (parâmetros ajustáveis: salinidade, pH, viscosidade, natureza de íons e contra-íons na solução). Por outro lado, a natureza magnética destes novos materiais, possibilita a sua utilização neste campo, como um vetor que pode ser monitorado magneticamente, dentro de sistemas "in vitro" e "in vivo". Neste sentido, o estudo para o emprego de fluidos magnéticos, como vetor de drogas quimioterápicas, por exemplo, se torna cientificamente excitante. Neste trabalho, apresentamos resultados experimentais preliminares, na elaboração de fluidos magnéticos biocompatíveis. No modelo do fluido magnético iônico, partículas magnéticas da ordem de 100 Å, sintetizadas quimicamente, são peptizadas em meio aquoso e a estabilidade coloidal é assegurada pela criação de uma densidade de carga elétrica superficial ajustável. Com efeito, esta repulsão estabilizante, que se contrapõe as interações van der Waals e do tipo dipolo magnético, é criada graças a uma adsorção específica de grupos hidroxil anfotéricos ( dependência do pH) e pode ser afetada por fenômenos de blindagem que dependem da concentração de íons estranhos na solução e também da natureza destes íons. Neste estudo nós investigamos a possibilidade de substituição desta superfície anfotérica (pH<6 ou pH>10) por agentes quelantes diversos no sentido de abaixar o ponto de carga nula das partículas tornando-as estáveis numa larga faixa em torno do pH 7. Nossos resultados demonstram a possibilidade da utilização de agentes complexantes do tipo  $\alpha$ -ácidos na elaboração de fluidos magnéticos estáveis em meios biológicos.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## MICELLAR CHANGES AT H-N<sub>c</sub> AND N<sub>c</sub>-N<sub>ba</sub>-N<sub>d</sub> PHASE TRANSITIONS IN LYOTROPIC LIQUID CRYSTALS,

L. Q. Amaral<sup>1</sup> and O. Santin Filho<sup>2</sup>, 1 - Institute of Physics, University of São Paulo, C.P.66318, 05389-970 - São Paulo, SP, Brasil; 2 - Universidade Estadual de Maringá, PR, Brasil.

Keywords: micellar changes, phase transition, bending energies

The curvature of the interface apolar-polar in surfactant/water systems is characterized by the surfactant parameter  $p = v/al$  ( $v$  = hydrophobic chain volume,  $a$  = polar head area,  $l$  = chain length). The value  $p_0$  (in absence of external bending stress) defines the molecular packing and the form of the aggregates (sphere, cylinder, lamella for  $p_0 = 1/3, 1/2, 1$ , respectively). The bending energy  $E_{ben}$  of a given aggregate form can be calculated as the integral of  $(p - p_0)^2$  over the total interface area. This formalism, initially intended for bilayer membranes, was extended to micellar aggregates[1]. It was shown [1] that changes of micellar form from ellipsoid to spherocylinder (SC) are a pre-requisite for the occurrence of the isotropic (I)-hexagonal (H) phase transition because the SC form allows polydisperse growth. These ideas are extended to transitions to nematic (N) phases in ternary systems (addition of decanol). Calculations of  $E_{ben}$  in the case of mixing of surfactant and co-surfactant molecules with different  $p_0$  values show [2] that a change of form SC  $\rightarrow$  rectangular tablet (RT)  $\rightarrow$  square tablet (ST) is expected both for increasing additions of co-surfactant and changes of  $p_0$  values. A remarkable agreement is obtained with observed phase transitions H-N<sub>c</sub> (nematic cylindrical) and N<sub>c</sub>-N<sub>ba</sub> (biaxial nematic) - N<sub>d</sub> (nematic discotic) for changes in concentration and temperature in the systems with SDS (sodium decyl sulfate), KL (potassium laurate) and SLS (sodium dodecyl sulfate) as surfactants and decanol as co-surfactant. The results here reported together with recent proposals [3] regarding the structure of phase H and its transitions to cubic phases lead to a novel insight on lyomesophases.

[1] G.Taddei and L.Q.Amaral, J.Phys.Chem.96, 6102 (1992). [2] O.Santin Fº, N.Vila Romeu, G.Taddei and L.Q.Amaral (submitted). [3] L.Q.Amaral et al, Phys.Rev.E 46, 3548 (1992); P.Mariani and L.Q.Amaral, Phys.Rev.E 50, 1678 (1994); P. Mariani et al, J.Physique II 4, 1393 (1994).

## EFEITOS DA BARREIRA SUPERFICIAL NO NIÓBIO SUPERCONDUTOR

Marcos A. Avila\*, Claudio A. Cardoso\*, Rubens de Andrade Jr.<sup>1</sup> e Oscar F. de Lima\*

\*Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Universidade Estadual de Campinas

<sup>1</sup>Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos

**Palavras-Chave:** Barreira Superficial, Nióbio, Supercondutor

Em supercondutores do tipo II, a presença de interfaces leva à formação de uma barreira de energia para a entrada e saída de fluxóides da amostra, a chamada Barreira Superficial de Bean-Livingston. Em consequência, o comportamento magnético destes supercondutores pode ser fortemente afetado, resultando em curvas de magnetização bastante distintas do esperado para o comportamento volumétrico do material. Neste trabalho, utilizamos um magnetômetro SQUID para realizar experiências de magnetização  $\times$  campo, magnetização  $\times$  temperatura e magnetização  $\times$  tempo em duas amostras de nióbio, uma esfera policristalina e uma barra monocristalina. As medidas foram realizadas com as superfícies das amostras inicialmente brilhantes, repetidas após submetemos as amostras a um lixamento controlado das suas superfícies, e com estes dados realizamos uma análise comparativa entre os dois conjuntos de medidas. As curvas de magnetização  $\times$  temperatura mostraram uma maior aproximação, com o lixamento, entre os ramos ZFC e FCC, estendendo a região reversível até temperaturas mais baixas. A linha de irreversibilidade  $H_r(T)$  resultante destas curvas mostrou um comportamento reentrante. Ela destaca-se da linha  $H_{c2}(T)$  a partir de  $T_c(0)$  e segue um comportamento semelhante ao de *depinning* volumétrico até uma certa temperatura, abaixo da qual  $H_r(T)$  curva-se em direção a  $H_{c2}(T)$  até juntar-se novamente a esta. As curvas de magnetização  $\times$  tempo mostraram uma assimetria entre as taxas de relaxação com entrada e saída de fluxo, e esta assimetria diminui com o lixamento da superfície. Nossas análises sugerem que estes efeitos são provocados pela barreira superficial, e que esta se manifesta mais fortemente na região de altos campos e baixas temperaturas.

(FAPESP e CNPq)

## SUPERCONDUCTIVITY IN A<sup>IV</sup>B<sup>VI</sup> SEMICONDUCTOR COMPOUNDS WITH GROUP III ELEMENT IMPURITIES

Mashovets D.V., Nemov S.A., Parfeniev R.V., Shamshur D.V.

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

**Keywords:** superconductivity, semiconductors, band structure, impurity states

A new class of superconducting materials based on PbTe-SnTe and SnTe-GeTe solid solutions with deep impurity resonant states of Tl or In has been discovered and investigated. Specific properties of these materials are due to very high density of states in the impurity band formed by quasi-local states of In or Tl impurities on the background of the valence band spectrum.

Additional acceptor doping (excess Te or Na) allowed to control the Fermi level position inside the impurity band, thus changing superconducting and normal properties of these materials and approaching maximal values of  $T_c$  for particular compound. The correlation has been established between the filling factor of holes in the impurity band, superconductivity parameters ( $T_c$ ,  $H_{c2}(0)$ ,  $\partial H_{c2}/\partial T|_{T_c}$ ) and resonance scattering in normal state. The substitution of Pb for Sn in PbTe-SnTe:In solid solutions affects strongly the parameters of superconducting state and allows to rise  $T_c$  up to 4.2K (instead of  $T_c \approx 0.2K$  for SnTe and  $T_c < 0.02K$  for PbTe).

It is shown that necessary conditions for the appearance of superconductivity with  $T_c > 1K$  are: i) the Fermi level lies in the impurity band; ii) impurity states lie in the vicinity of the additional heavy-hole band extremum with high density of states ( $\Sigma$  - extremum in materials based on PbTe:Tl and  $\Sigma$  or  $\Delta$  - extrema in materials based on SnTe:In).

Both bulk and thin-film samples of the PbTe-SnTe-GeTe systems were studied, and the possibility to obtain thin film materials with  $T_c$  near liquid helium temperature has been demonstrated, thus opening a perspective for technical applications, e.g., for superconducting radiation detectors.

## PHYSICAL CHARACTERIZATION OF THE SEMICONDUCTORS $\text{RBa}_2\text{Fe}_3\text{O}_x$ (R = Y, rare earth): DIFFERENCES AND SIMILARITIES WITH THE SUPERCONDUCTORS $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$

Amal Elzubair, P.H. Domingues, M.A. Neves, M. da Silveira, L.M.R. Olivera, I. Abrego Castillo, L. Ghivelder, H. Salim, M. Amaral and M. El Massalami

IF-UFRJ, C.P. 68528, Rio de Janeiro, RJ, 21945-970

**Keywords:**  $\text{RBa}_2\text{Fe}_3\text{O}_x$  Perovskites, mixed valency, Oxygen-stoichiometry

The  $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  and  $\text{RBa}_2\text{Fe}_3\text{O}_x$  series are perovskite-derived ceramic oxides. The former series is the well studied HTc superconductors, while the latter shows semiconducting behavior and its physical properties are not well investigated. The aim of this study is to characterize and to compare the physical features of the Fe-series with those of the cuprates. The following techniques were utilized: room-T X-ray diffraction, thermal analysis (DTA, TGA,  $300\text{K} < T < 1300\text{K}$ ), magnetization ( $H < 80\text{kOe}$ ,  $1.2\text{K} < T < 1073\text{K}$ ), Mossbauer spectroscopy ( $4.2\text{K} < T < 1100\text{K}$ ), magnetoresistivity ( $H < 80\text{kOe}$ ,  $1.2\text{K} < T < 1073\text{K}$ ) and specific heat ( $20\text{K} < T < 200\text{K}$ ). The overall structural behavior and oxygen (de)loading effects bear a strong resemblance with the cuprates: as expected from the similarities in the ionic radii and oxygen-coordination of the Cu- and Fe-ions. The magnetic properties of Fe-series are dominated by the localized Fe-moment, while the transport features are dictated by Arrhenius-type processes with activation energies that progressively increase with the decreasing  $\text{R}^{3+}$  ionic size. The Fe-series (as opposed to the cuprates) shows two identifiable classes: the R = Y, Ho, Dy and Tb class has triperovskite unit cell, stoichiometric oxygen,  $\text{Fe}^{3+}$  in the spherical  $^6\text{S}$  state and high  $T_N$ s. The other class, where R=La, Nd, Sm, Eu and Gd, shows quasi-cubic unit cell, mixed-valence Fe-states ( $\text{Fe}^{3+}$  and  $\text{Fe}^{2+}$ ) and no well-defined magnetic phase transition. This classification is attributed to the degree of disorder in the distribution of  $\text{Ba}^{2+}$  and  $\text{R}^{3+}$  ions. Finally, similar to the case of Cu-series, all the measured physical parameters can be rationalized in terms of the  $\text{R}^{3+}$  ionic sizes.

## SUPERCONDUTIVIDADE NA LIGA QUASECRISTALINA $\text{Al}_6\text{Ru}$

Suzana Nóbrega de Medeiros, Fernando Luis de Araujo Machado,  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE Brasil

**Palavras Chave:** quasecristais, supercondutividade, diagrama de fase

Quasecristais são materiais que apresentam picos de difração associados à simetria orientacional de longo alcance. Em geral, as simetrias pertencem a grupos proibidos cristalograficamente. Até hoje, pouco se sabe sobre as propriedades supercondutoras dos quasecristais. No presente trabalho apresentamos medidas de resistividade, magnetoresistência, tensão versus corrente e susceptibilidade magnética na liga quasecristalina  $\text{Al}_6\text{Ru}$ . As medidas foram feitas em um criostato de  $^3\text{He}$ -líquido (LHe3) que opera no intervalo de temperatura  $0.27 \leq T \leq 300\text{K}$  e de campo magnético  $0 \leq H \leq 8\text{T}$ . As medidas de transporte foram feitas em pedaços da liga com 5.5mm de comprimento, 2mm de largura e  $35\mu\text{m}$  de espessura. O  $\text{Al}_6\text{Ru}$  apresenta supercondutividade abaixo de  $T_{c2} = 1.66\text{K}$ , ficando completamente supercondutor em  $T_{c1} = 0.8\text{K}$  para uma corrente de  $520\mu\text{A}$ . Foi observado uma variação de  $T_{c2}$  com H que pode ser descrita pela expressão  $H_{c2} = H_{c2}(0) (1 - (T_{c2}(H)/T_{c2}(0))^2)$ , onde  $H_{c2}$  é o campo necessário para destruir a supercondutividade e  $H_{c2}(0) = 0.43\text{T}$ . Para  $T_{c1}$ , o comportamento em função de H pode ser representado por uma curva do tipo de Almeida-Thouless (linha A-T):  $H_{c1} = H_{c1}(0) (1 - T_{c1}(H)/T_{c1}(0))^{1/2}$ , com  $\phi = 3$  e  $H_{c1}(0) = 0.11\text{T}$ . A largura da transição e a linha A-T podem estar associadas com a desordem estrutural presente na fase quasecristalina. Observamos também uma forte dependência de  $T_c$  e  $H_c$  com a amplitude da corrente elétrica utilizada nas medidas. A dependência com a temperatura da corrente crítica foi obtida a partir das curvas  $V \times I$ . Os resultados mostram uma grande semelhança entre as propriedades supercondutoras, e o seu respectivo diagrama de fase H-T, da liga quasecristalina  $\text{Al}_6\text{Ru}$  e a dos supercondutores de alta temperatura que também são materiais granulares.

Trabalho parcialmente financiado pela FINEP, PADCT, CNPq, FACEPE e CAPES.

## OBSERVATION OF GRANULAR SUPERCONDUCTIVITY IN POLYCRYSTALLINE $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ \*

H. A. Blackstead,<sup>1</sup> R. F. Jardim,<sup>2</sup> A. E. Klunzinger,<sup>1</sup> and D. B. Pulling<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, University of Notre Dame, Notre Dame IN 46556, USA

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C. P. 66318, 05389-970, São Paulo, Brazil

*Palavras-chave:* granular superconductivity, surface resistance, Meissner effect

We have measured electrical resistivity  $\rho(T)$ , magnetization  $M(T)$ , and the rf surface resistance  $R_s(B, T)$  versus temperature and applied magnetic fields in polycrystalline samples of  $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ ;  $0.15 \leq x \leq 0.18$ ; which exhibit the double resistive superconducting transition. In the rf surface resistance measurements the samples were mounted on the bottom of a  $\text{TE}_{101}$  microwave cavity in the region of maximum rf magnetic field and minimum rf electric field. The resonant frequency of the cavity was 12.9 GHz. The static magnetic field  $B$  was applied in the sample plane and could be rotated relative to the fixed direction of the current density  $J$ . Two configurations are of special interest: those with the applied field parallel and perpendicular to  $J$ . In these configurations the Lorentz force on fluxons is minimum (nominally zero) and maximum, respectively. Changes in the resistive dissipation arising from the temperature and field dependence of the surface resistance were detected by measuring the changes  $\Delta R_s(B, T) = R_s(B, T) - R_s(B = 0, T)$  or  $\Delta R_s(B = 0, T) = R_s(B, T) - R_s(B, T = T_0)$  where  $T_0$  is a low starting temperature. Changes in the surface resistance are determined by measuring changes in the powder reflected from the cavity using a point contact diode. Based on these results, we confirm the onset of granular superconductivity in the high temperature superconductor  $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ ;  $0.15 \leq x \leq 0.18$ ; at temperatures for which there is no evidence for a bulk Meissner effect.

\* Work supported by the Brazilian agencies FAPESP (contract No. 93/4204-4) and CNPq (contract No. 400896/93-1).

## SUPERCONDUCTIVITY AND NORMAL STATE MAGNETISM OF $\text{CaLaBaCu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{O}_7$ SUPERCONDUCTOR, $x = 0.0, 0.03$ AND $0.06$ .

V.P.S. Awana, D.A. Landinez Tellez and J. Albino Aguiar.

Depto de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, RECIFE, PE, BRASIL.

Rajveer Singh and a.V. Narlikar

National Physical Laboratory, K.S. Krishnan Marg, New Delhi, 110012, INDIA.

The results of superconductivity and normal state, i.e above  $T_c$ , magnetism of the  $\text{CaLaBaCu}_{3-x}\text{Fe}_x\text{O}_7$  superconductor are to be presented, being studied with the help of a SQUID magnetometer. The transition temperature  $T_c$  (70K), of pristine sample determined from the AC susceptibility measurements decreases with an increase in the doped Fe concentration. The normal state high field (5 Koe) DC magnetism of these samples inferred that the pure sample ( $x=0.0$ ) bears a less and nearly temperature independent molar susceptibility, while the Fe doped samples follows the Curie-Weiss relation in terms of the paramagnetic moment on the doped Fe. The effective paramagnetic moment on Fe in these samples gives a reduced value than of  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$  known moments, namely  $5.07 \mu_B$  for  $x=0.03$  and  $4.67 \mu_B$  for  $x=0.06$  samples, probably due to crystal field effects present in these materials.

**Key Words:** HTSC systems,  $\text{CaLaBaCu}_3\text{O}_7$  superconductor, Fe doping and Normal state magnetism.

## LASER STABILIZATION TO THE HERTZ LEVEL AND APPLICATION TO A Hg<sup>+</sup> OPTICAL FREQUENCY STANDARD

*F.C.Cruz and J.C.Bergquist*

National Institute of Standards and Technology, Time and Frequency Division  
Boulder, CO, 80303, USA

**KeyWords:** laser stabilization, frequency standard, trapped ions

Trapped and laser-cooled ions may provide the basis for future frequency and time standards. Extremely high-resolution is possible with trapped ions because of small perturbations and long interrogation times. The reduction of kinetic energy by laser cooling reduces systematic shifts to extremely small levels. An optical frequency standard based on a single trapped and laser-cooled <sup>199</sup>Hg<sup>+</sup> ion is a very attractive one and might reach an accuracy below 10<sup>-17</sup>. The quadrupole <sup>2</sup>S<sub>1/2</sub>-<sup>2</sup>D<sub>3/2</sub> clock transition at 282 nm has a natural linewidth of less than 2 Hz and can be detected with 100% efficiency by electron shelving. By interrogating this transition with the time domain Ramsey method the stability can be about 7x10<sup>-16</sup> (τ<sup>-1/2</sup>), provided that the laser linewidth is less than 1 Hz for times of up to a few seconds. Here we report our progress in stabilizing a laser to the Hertz level. We use a Nd:FAP laser at 1.126 μm, which is frequency doubled to 563 nm and doubled again to 282 nm. The second harmonic of the Nd:FAP laser is locked to a high-finesse reference cavity that is suspended in a temperature regulated, evacuated chamber that is passively shielded against seismic perturbations. Low frequency corrections to the Nd:FAP laser is done by controlling its cavity length with one of its mirrors mounted to a piezoelectric transducer. Faster corrections are done by an acousto-optic modulator outside the laser cavity. The laser linewidth is measured by heterodyning two independent systems or by locking to the atomic transition in Hg<sup>+</sup>. An analysis of the frequency contributions to the linewidth is performed by Fourier analysing the beat note between the two independent systems.

## AN ALL-SOLID-STATE CW SINGLE-FREQUENCY LASER SOURCE AT 194 nm

*F.C.Cruz, D.J.Berkeland, M.Rauner and J.C.Bergquist*

National Institute of Standards and Technology, Time and Frequency Division  
Boulder, CO, 80303, USA

**KeyWords:** diode laser, sum-frequency mixing, laser cooling

The extension of the spectral region covered by diode lasers, or more generally solid-state lasers, towards shorter wavelengths has been of considerable interest and object of intense research. One way to generate visible or ultraviolet light with solid-state sources is by harmonic generation or frequency mixing in nonlinear crystals. Here we report the generation of cw single-frequency radiation at 194 nm using all-solid-state laser sources. Radiation at 194 nm is used to laser cool and optically detect <sup>199</sup>Hg<sup>+</sup> trapped ions by exciting its strong <sup>2</sup>S<sub>1/2</sub>-<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub> transition. We generate 194-nm radiation by sum-frequency mixing radiation at 257 nm and 790 nm in an external cavity, using BBO. Radiation at 257 nm can be obtained as the 4<sup>th</sup> harmonic of 1.03-μm radiation from a diode pumped Yb:YAG laser. With 1 W of single-frequency fundamental power at 1.03 μm more than 500 mW can be produced at 515 nm. We have achieved a conversion efficiency of about 30% in doubling 515 nm to 257 nm in an external cavity using BBO. Single-frequency radiation at 790 nm is generated from a diode laser in Littman configuration (master laser) which injection seeds a tapered semiconductor laser/amplifier (slave laser). More than 700 mW of single-frequency light at 790 nm in the TEM<sub>00</sub> mode is obtained with injection of about 6 mW from the master laser. Excellent mode quality of the slave laser beam was observed by mode-matching into the sum-frequency cavity. Phase-locking between the master and slave laser was verified by heterodyning the master laser and the frequency-shifted slave laser beam. With these power levels about 200 μW of power at 194 nm can be obtained.

## LASERS SEMICONDUTORES MODE-LOCKED DE MÚLTIPLAS SEÇÕES PARA GERAÇÃO DE PULSOS CURTOS (1ps) A ALTAS TAXAS DE REPETIÇÃO (375 GHz)

*Joaquim F. Martins-Filho*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE

e

*Charles N. Ironside*

Department of Electronics and Electrical Engineering, University of Glasgow, Scotland-UK

**Palavras-chave:** fabricação de lasers semicondutores, mode-locking, comunicações ópticas

Lasers semicondutores passivamente mode-locked, monolíticos, em material tipo poço quântico, são capazes de produzir pulsos curtos (da ordem de 1 ps ou menos), à altas taxas de repetição (acima de 100 GHz), pois eles não necessitam da injeção de sinais elétricos de alta frequência. Esses dispositivos têm um amplo leque de aplicações, que podem ser divididos em telecomunicações, computação óptica, e medição e caracterização optoeletrônica. Neste trabalho nós apresentamos uma nova configuração de laser mode-locked: o laser MCPM (multiple colliding pulse mode-locked), que é um laser semicondutor de múltiplas seções, monolítico, passivamente mode-locked, que pode gerar pulsos curtos em harmônicos da frequência de oscilação (round trip) da cavidade, dependendo do sinal elétrico DC aplicado a cada uma de suas seções. O laser MCPM é fabricado em substrato de GaAs/AlGaAs, contendo 4 poços quânticos. O laser tem uma seção de ganho continuamente eletricamente conectada e 3 seções independentes, posicionadas a cada quarto de comprimento de cavidade. Cada uma das 3 seções é separadamente eletricamente acessável; quando está sob uma tensão reversa funciona como absorvedor saturável, e quando diretamente polarizada a seção funciona como região de ganho para o laser. Portanto, através da seleção da polarização elétrica, pode-se escolher o número e a posição dos absorvedores saturáveis na cavidade do laser, o que leva o laser a ter 1, 2, 3 ou 4 pulsos circulando na cavidade, gerando do primeiro (fundamental) até o quarto harmônico da taxa de repetição, respectivamente. Um laser MCPM de 400  $\mu\text{m}$  de comprimento de cavidade, com 3 seções de 15  $\mu\text{m}$  de comprimento, produz pulsos de 1 ps de duração, a até 375 GHz de taxa de repetição (quarto harmônico).

(CNPq, EPSRC-Escócia)

## MEDIDAS DO GANHO DIFERENCIAL E SATURAÇÃO DO GANHO EM LASERS SEMICONDUTORES ATRAVÉS DA RESPOSTA EM FREQUÊNCIA

*E.J.T.Manganote, A.C.G.Bordeaux-Rego, A.A.Bernussi, M.T.Furtado,  
M.Giansante e A.Amorim*

CPqD-TELEBRÁS, C.P. 1579, Campinas 13088-061, SP

**Palavras-chave :** lasers semicondutores, resposta em frequência, ganho diferencial

Há um interesse muito grande nas propriedades dinâmicas dos lasers semicondutores, principalmente quando modulados diretamente em altas taxas e aplicados em sistemas de transmissão por fibras ópticas. Neste caso, a intensidade de modulação é alta e não permite soluções analíticas para as equações de taxa, como acontece quando trabalhamos no regime de pequenos sinais. Todavia, a precisão destas soluções depende fortemente dos valores dos vários parâmetros dinâmicos intrínsecos do laser semicondutor, como: o ganho diferencial ( $\partial g/\partial N$ ), o fator K e o coeficiente de saturação do ganho ( $\epsilon$ ). Estes parâmetros podem ser obtidos se conhecermos a variação da frequência de ressonância e da taxa de amortecimento em relação à potência óptica emitida, na aproximação de pequenos sinais. Neste trabalho apresentamos a implementação de um método simples e preciso para a extração da frequência de ressonância e do fator de amortecimento, através da subtração logarítmica das curvas de resposta em frequência, em diferentes correntes de polarização. Estes dados são comparados com resultados obtidos através de medidas do espectro do ruído relativo (RIN), apresentando boa concordância. Foram realizadas medidas em um laser Fabry-Perot emitindo em 1300nm, com uma estrutura de confinamento DD-DCPBH, e os resultados obtidos foram os seguintes:  $\partial g/\partial N = 2.56-2.82 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ ,  $\epsilon = 3.92-4.72 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$  e  $K=0.31 \text{ ns}$ . Este valor de K sugere uma banda passante máxima para este dispositivo em torno de 28.4 GHz.

## DEVELOPMENT OF A CONTINUOUS WAVE, DIODE END-PUMPED, ND:YLF LASER

*Edison Puig Maldonado, Izilda Marcia Ranieri,  
Spero Penha Morato and Nilson Dias Vieira Junior*

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

*Palavras-chave:* laser, bombeamento óptico, diodo-laser

Due to the low thermal load and high efficiencies, several solid-state lasers longitudinally pumped by semiconductor lasers are object of current interest. These systems have the advantage of high pumping rates, stability and compactness. In these cases, the overlap of the spatial distribution of the pumping and emission beams, in the active medium region, are of fundamental importance. In order to attain high output powers, semiconductor lasers have highly asymmetric profiles of the active region, with short dimensions in the junction direction and broad transversally, being the output laser beam also asymmetric, with low spatial coherence. Since this represents a bottleneck to obtain an optimum pumping beamwaist, several developments of alternative pumping geometries are currently object of study. However, frequently, the traditional end-pumping scheme of cylindrically symmetric laser cavities can be sufficient to attain high optical efficiencies, besides high output powers. In this work, we have demonstrated the efficient operation of a Nd:YLF laser, operating continuously in a symmetric TEM<sub>00</sub> mode, end-pumped by an asymmetric diode-laser beam. For the best configuration, 1.2 W of output power was obtained, at  $\lambda = 1047$  nm, for 3 W of diode-laser pump power, at  $\lambda_p = 797$  nm. This high optical efficiency, 40%, corresponds to the current result usually reported for diode-pumped Nd:YLF lasers, but in the present case no special procedure was used in order to have a symmetric pumping beam profile. The overall, electric-to-optic, efficiency was around 11%. This exemplifies, besides the stability, compactness, and low necessary infra-structure of this system, the revolutionary aspects of this new technology, specially when compared with lamp-pumped Nd laser systems.

(FAPESP)

## CARACTERÍSTICAS ÓPTICAS OTIMIZADAS DE LASER DFB: RESULTADOS EXPERIMENTAIS E MODELAMENTO

*Ildefonso Felix de Faria Jr, Alberto Paradisi, Walter J. Carvalho de Oliveira e Ederval Missio*  
CPqD - Telebrás - Cx.P. 1579 Campinas, SP - CEP 13088-061 (email: felix@cpqd.br)

*Palavras Chave:* Laser DFB

Os lasers DFB são usados em larga escala nos sistemas de comunicações ópticas atuais. Entre as propriedades básicas necessárias estão a garantia de emissão em um único modo, a estreita largura de linha e a sua banda passante elétrica. Neste trabalho propomos a otimização das propriedades ópticas de um laser DFB para garantir o funcionamento em regime monomodal e obter um bom acoplamento com fibras ópticas. A rede de difração responsável pela realimentação distribuída tem a capacidade de selecionar um único modo. No entanto as dimensões do guia de onda podem resultar em fraca diferença de ganho entre vários modos. Somando-se a isto os efeitos de "hole burning", provocado pelo acúmulo de fótons na região central do laser, que ocorre devido ao acoplamento da luz com a rede de difração, observa-se uma competição entre diferentes modos da cavidade. Por este motivo grande porcentagem dos lasers apresentam limitação na potência óptica em regime de operação monomodo.

Neste trabalho apresentamos os resultados teóricos e experimentais obtidos de dois diferentes desenhos de laser. No primeiro caso a rede de difração localiza-se diretamente adjacente à primeira camada que compõe o guia de onda. No segundo caso foi introduzida uma camada de InP entre a rede e a camada ativa do laser. Denominamos este último de laser com rede enterrada, pois fica imersa entre camadas de InP. Com esta modificação as características de emissão foram sensivelmente melhoradas: O ganho mais importante foi o aumento da potência limite para operação monomodo que passou de 1-3mW para valores acima de 8mW para grande número de lasers. Isto ocorre porque os modos TM<sub>00</sub> e TE<sub>01</sub> são eliminados. O campo afastado passou de 30X50 para 30X40 graus e o acoplamento óptico com a fibra óptica com micro-lente, que passa de 40% para 55%.

## LASER SINTONIZÁVEL DE ALTA TAXA EM FIBRA DOPADA COM ÉRBITO UTILIZANDO UM ACOPLADOR DIRECIONAL ELETRO-ÓPTICO

*C.Mazzali e H.L.Fraguito*

Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp - SP

*Palavras-Chave:* comunicações ópticas, lasers, solitons

Atualmente os amplificadores ópticos vêm substituindo com sucesso os repetidores eletrônicos nas linhas de comunicações ópticas, o que foi decisivo para a escolha da região espectral de 1.5  $\mu\text{m}$  como a mais promissora para os novos sistemas, gerando conseqüentemente uma demanda de fontes lasers neste comprimento de onda. Nestes enlaces totalmente ópticos e que utilizam o sistema RZ, onde os pulsos são amplificados a cada 30-50 km sem passar ao formato elétrico em nenhum momento, os efeitos da automodulação de fase e da dispersão de centenas ou até milhares de quilômetros de fibra implicam em severas limitações no formato espectro-temporal dos pulsos do laser.

A fonte aqui apresentada consiste numa cavidade em anel de fibra dopada com Érbio que utiliza um novo conceito de configuração híbrida mode-locking cavity damping, onde um modulador Y (acoplador direcional) com uma entrada e duas saídas ópticas, e controlado por um sinal de RF e uma polarização DC, promove a abertura da cavidade em uma taxa de repetição múltipla da frequência natural de oscilação do anel. Esta configuração permite que toda a potência que circula na cavidade seja aproveitada durante o pulso e minimiza as perdas devidas ao acoplador de saída no intervalo entre os pulsos, já que neste período o modulador mantém a cavidade totalmente fechada.

Os resultados apresentados consistem em pulsos de 28 ps (FWHM) e largura de banda de 0.15 nm com potência de pico superior a 8mW. O laser é sintonizável entre 1530 e 1565 nm e foi demonstrada operação em taxas de repetição variando de 2 a 2.6 Ghz. Tais características (produto largura de banda-duração do pulso próxima a 0.315) e a alta potência de saída permitem que esta fonte seja utilizada também em sistemas solitônicos.

(CAPES, CNPq, CPqD Telebrás, FAPESP, FINEP, PADCT)

## TEMPERATURE SENSITIVITY OF QUATERNARY MULTI-QUANTUM WELL LASERS

*A.A. Bernussi<sup>‡</sup>, and H. Temkin<sup>†</sup>*

<sup>‡</sup> CPqD - Telebras, Campinas, SP 13088-061, Brazil

<sup>†</sup> Electrical Eng. Department, Colorado State University, Ft. Collins CO 80523, USA

*Keywords:* temperature, spontaneous emission, quaternary quantum wells.

Long-wavelength semiconductor lasers operating without cooling at high temperatures are useful in a variety of optical interconnect applications. Multi-quantum well lasers (strained and lattice matched) with quaternary InGaAsP wells and barriers have been shown to be very attractive sources, capable of achieving the desired high temperature performance. These lasers show low threshold currents, high efficiencies and maximum operating temperatures well above 100°C. However, the mechanisms limiting the high temperature performance remain poorly known and the design of effective laser structures continues to be purely empirical. In this work we used spectrally resolved measurements of spontaneous emission to investigate the temperature sensitivity of strained and lattice matched InGaAsP multi-quantum well lasers. Carrier overflow into the barriers and separate confinement layers and the resulting recombination are demonstrated to be an important factor limiting high temperature performance in these devices. The barrier recombination does not saturate above threshold, instead it increases with the drive current. This effect is further enhanced with increased temperature. The increase of carrier overflow with current was attributed to finite time capture processes in the quantum wells. At high temperatures thermionic emission of carriers becomes increasingly important. Both effects degrade the high temperature performance of quaternary quantum well lasers. We show that the reduction in the barrier recombination correlates quantitatively with increased high temperature slope efficiency.

## THERMODYNAMIC AND KINETIC STUDIES OF THE THERMAL DENATURATION OF THE KM+ LECTIN

R. A. Silva-Lucca, M. Tabak, O. R. Nascimento, L. M. Beltramini.

Depto. de Física e Informática-IFSC-USP; \*Depto. de Química e Física Molecular-IQSC-USP - 13560 São Carlos.

**KEY WORDS:** Lectins, Circular Dicroism (CD), Fluorescence

Lectins are carbohydrate-binding proteins that have been used as a tool for studies of structure and binding of cell membranes. We studied the properties and molecular structure of KM+ a lectin from *Artocarpus integrifolia*. KM+ has the property of inducing neutrophil migration "in vivo" and "in vitro". CD data analysis indicated that KM+ is rich in  $\beta$ -sheet. In this work, the unfolding of KM+ lectin under several conditions: pH, temperature, urea and guanidine hydrochloride has been studied by circular dichroism (CD) and fluorescence spectroscopy. The fluorescence emission maximum shifted from 328nm at pH 7.0, to 340nm at pH 12.0 and the quantum yield diminished pronouncedly. There were not changes in secondary structure as a function of pH, guanidine hydrochloride or urea as showed by CD spectra. These results indicated that the tetrameric structure of KM+ is strongly compacted in a large range of pH and it is not modified by chemical denaturant agents. In the thermal unfolding, was observed loss of secondary structure above 55°C, monitored by CD. The fluorescence emission spectra changed from 328nm at 25°C, to 347nm at 75°C, and above 45°C resulted in the increase of its half-width, probably due to the appearance of a small spectral contribution from the tyrosine residues at 300nm. The transition temperatures,  $T_m$ , calculated by CD and fluorescence data were 339 and 335 K respectively. The activation energies,  $E_a$ , in this reaction calculated by kinetic studies at fixed temperatures and the thermodynamic studies with temperature variation, were  $108 \pm 6.6$  KJ/mole (kinetic approach),  $134 \pm 11$  KJ/mole from the CD data and  $276 \pm 12$  KJ/mole from the fluorescence data (thermodynamic approaches). The analysis of these data by fit to the Arrhenius equation showed irreversible denaturation between N→D (native→denatured) forms and there are intermediary forms, what means modifications in the quaternary and/or tertiary structures.

(CNPq)

## EFEITO DE CÁTIOS DIVALENTES NA ADSORÇÃO DE 5'-ATP SOBRE CAULINITA: UM MODELO PARA INTERAÇÕES PRÉ-BIÓTICAS COM BIOMONÔMEROS.

<sup>1</sup>Coelho-Souza, T. \*, <sup>1</sup>Tessis, A.C. \*\*, <sup>2</sup>Amorim, H. S., <sup>2</sup>Barros, F.de S., and <sup>1</sup>Vieyra, A.  
<sup>1</sup>Departamento de Bioquímica Médica, <sup>2</sup>Departamento de Física dos Sólidos, UFRJ

**Palavras-Chave:** biomonômeros, argila, adsorção

**Objetivos:** Bernal (1951) sugeriu que o papel de argilas na evolução química é o de adsorção preferencial de monômeros biológicos. Recentemente, demonstramos (Tessis e Vieyra, J.Mol.Evol., 1996, no prelo) que a troca de cátions em minerais fosfáticos modifica suas capacidades adsorventes. O propósito deste trabalho é a investigação da adsorção de mono-nucleotídeos sobre caulinita e a influência de cátions divalentes neste processo. **Métodos e Resultados:** Caulinita de Sete Lagoas (MG) (95% pura), foi tratada com soluções de  $Ca^{2+}$  ou  $Zn^{2+}$  para promover a intercalação destes cátions na estrutura lamelar da argila. A isoterma de Langmuir indica que a caulinita adsorve 5'-ATP com alta afinidade, e que, por não haver adsorção de 5'-AMP, a cadeia polifosfática é essencial para o processo. A intercalação de  $Ca^{2+}$  e  $Zn^{2+}$  nas camadas individuais, modifica as propriedades de adsorção do mineral, incluindo variações no número de sítios disponíveis. Ademais, existe uma modulação cruzada da adsorção decorrente da mudança de pH e de cátions: a variação da adsorção com pH para a caulinita-Zn (máxima em pH ácidos) é a imagem especular da observada para a caulinita-Ca. Difractogramas de raios x revelam que as intercalações alcançadas nesse trabalho não promovem alterações da estrutura cristalina da argila. **Conclusões:** As propriedades adsorventes de argilas antigas são modificadas por cátions intercalados na estrutura cristalina. Flutuações na concentração dos cátions divalentes, nos ambientes aquosos primitivos, teriam, portanto, um papel importante na interação desses minerais com biomonômeros.

(Apoio financeiro: CNPq, FINEP e FUJB-UFRJ.)

## ADSORÇÃO E HIDRÓLISE DE ATP POR PIRITA: MODELO DE CATÁLISE PRIMITIVA EM SUPERFÍCIE METABÓLICA.

<sup>1</sup>Buarque, M.P.\*, <sup>1</sup>Fava, A.P.\*, <sup>1</sup>Tessis, A.C.\*\*, <sup>2</sup>Bonapace, J.A.P., <sup>3</sup>Amorim, H.S. de,  
<sup>3</sup>Barros, F. de S., <sup>1</sup>Vieyra, A.

<sup>1</sup>Departamento de Bioquímica Médica, <sup>2</sup>Departamento de Química Inorgânica, <sup>3</sup>Departamento de Física do Estado Sólido, UFRJ.

*Palavras-Chave:* adsorção, ATP, pirita

**Objetivos:** Foi sugerido que a formação da pirita ( $\text{FeS}_2$ ), a partir de  $\text{H}_2\text{S}$  e  $\text{Fe}^{2+}$ , é a fonte mais plausível de potencial redutor para uma origem química autotrófica da vida. Uma alternativa seria a de que a pirita poderia atuar como mineral adsorvente e catalisador. Neste trabalho, são examinados processos de adsorção e catálise de mononucleotídeos por pirita. **Métodos e Resultados:** Análise por raios x das amostras revela a presença de  $\text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; o mineral hospedeiro possuindo uma estrutura bem definida. A adsorção observada de ATP pode ser descrita por isotermas que variam entre classes L (com tampão acetato) e S (com água marítima artificial), indicando que o meio altera as interações entre o mononucleotídeo e a pirita. O ATP adsorvido sofre rápida hidrólise, e esta ainda se torna mais rápida quando  $\text{Ca}^{2+}$ , ou cátions orgânicos, são neutralizados por ácido acético. Não há hidrólise quando  $\text{Mg}^{2+}$  está presente no meio. A reação é também bloqueada quando: (i)  $\text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  ocluso nas amostras é parcialmente removido; (ii) deferoximiamina é adicionada; ou (iii) em presença de vanadatos com estrutura fosfática pentacoordenada. **Conclusões:** Os resultados corroboram a proposta de que a presença de minerais piríticos tenha tido papel importante em processos primitivos de catálise envolvendo nucleotídeos. As variações do ambiente aquoso primitivo poderiam modificari a cinética dessas reações.

(Apoio CNPq, FINEP e FUJB)

## ESPECTROFLUORÍMETRO DE MULTI-EXCITAÇÃO PORTÁTIL PARA DETEÇÃO DE DISPLASIAS *IN VIVO*

*Renato Amaro Zângaro, Landulfo Silveira Junior, Marcos Tadeu T. Pacheco, Irving Itzkan\*, Ramasamy Manoharan\*, Ramachandra Dasari\*, Michael Feld\**

CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

\*G. R. H. Spectroscopy Laboratory, Massachusetts Institute of Technology  
Cambridge, MA, USA

*Palavras-Chave: instrumentação, espectrofluorímetro, diagnóstico "in vivo"*

Neste trabalho é apresentado o projeto e desenvolvimento de um espectrofluorímetro portátil para a obtenção de Matrizes de Excitação-Emissão de Fluorescência (EEMs) de tecidos biológicos *in vivo* em aplicações clínicas, visando a aplicação da técnica de fluorescência no diagnóstico de displasias colon-retais. Medidas espectroscópicas *in vivo* apresentam problemas únicos, sendo os mais importantes relacionados com o tempo de obtenção do sinal. O sistema desenvolvido permite a medida da autofluorescência em 10 comprimentos de onda de excitação, além da reflexão difusa no mesmo local do tecido, numa faixa de excitação/emissão de 337nm-500nm/350nm -700nm em um período de tempo inferior à 600ms. A geração dos comprimentos de onda de excitação é obtida através de cuvets rotatórias contendo diferentes corantes bombeados por um laser de nitrogênio pulsado, em uma única cavidade ótica. O laser-bomba atua sincronizadamente com a passagem de cada curvete. Um catéter de fibras óticas permite a excitação do tecido e a coleção da autofluorescência em procedimentos endoscópicos. O sinal coletado é dispersado por um espectrógrafo compacto, e detetado por uma rede de fotodiodos com intensificador.

## NEAR INFRARED WITH A TUNABLE LASER AND MULTI CHANNEL RAMAN SYSTEM FOR BIO-TISSUE DIAGNOSIS

*S. Sathaiyah, L. Silveira Jr., R. A. Zângaro, M. C. Chavantes<sup>§</sup>, M. Tadeu T. Pacheco*

\*Departamento de Patologia da FMUSP, <sup>§</sup>Instituto do Coração do HCFMUSP

CEPEDEX/UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba, S.J. Campos - SP

E-mail: lope@univap.br

*Key Words :NIR Raman spectroscopy, deep depletion CCD detector, bio-tissue diagnosis*

Raman spectroscopy is a powerful non destructive analytical tool to study physical and chemical changes occurring in Bio-tissues and thereby offers exciting possibilities in diagnostic and therapeutic clinical applications. Using fiber-optic sampling techniques it's possible to probe remote or extreme environments and to study the bio-tissues *in vivo*. The major limitation in the use of Raman spectroscopy as a medical tool has been the strong fluorescence background from bio-materials which obscures the Raman signal. However, the problem can be circumvented by recognizing that bio-materials exhibit virtually no fluorescence with near infrared (NIR) excitation. To this end, we developed NIR multi channel Raman spectroscopy system consisting of tunable Ti:Sapphire laser pumped by an Argon ion laser, long beam steering optics with band pass filters, sample compartment with proper collection optics, notch filters to reject unwanted stray / Rayleigh light, an imaging spectrograph with holographic gratings and liquid nitrogen cooled deep depletion Charge Coupled Device (CCD) with computer interface system to record Raman spectra. Utilizing such a spectrograph - CCD based dispersive multi channel Raman system, it has been demonstrated that NIR Raman spectroscopy can be employed for discriminating between healthy and diseased tissues in human arteries. Further, it has been shown that NIR Raman spectra of human coronary arteries can be collected rapidly with collection times as small as 10 ms which makes it's clinical use feasible. (FINEP)

## SISTEMA DE ESTIMULAÇÃO CARDÍACA TRANSTORÁCICA NÃO INVASIVA

*Carlos E. Formigoni<sup>1</sup>, Carlos Alberto Pelá<sup>1</sup>, Antonio V. de M. Junior<sup>2</sup>*  
Departamento de Física e Matemática<sup>1</sup>, Unidade Coronariana do HC - USP<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Faculdade de Filosofia Ciências e Letras da USP - Ribeirão Preto - SP

<sup>2</sup> Faculdade de Medicina da USP - Ribeirão Preto - SP

*palavras-chave* : marca-passo, estimulação cardíaca, instrumentação cardíaca.

Neste trabalho desenvolvemos um equipamento capaz de realizar a estimulação cardíaca transtorácica. Este método baseia-se na aplicação de um campo elétrico, de intensidade e duração controlada, através de eletrodos colocados no tórax do animal. O equipamento desenvolvido neste trabalho inclui a função *sensing* permitindo aplicar os pulsos elétricos com segurança. O sistema de estimulação é formado por uma unidade de potência, um PC 386 com interface A/D e um monitor de ECG de superfície modificado. Um conjunto de rotinas programa, controla e faz o processamento do sinal de ECG cujos sinais são recebidos na derivação MC5. Um simulador cardíaco foi desenvolvido com a finalidade de testar o equipamento. O simulador foi construído em um recipiente de vidro retangular, com volume de 0,02 m<sup>3</sup> onde 8 eletrodos feitos em aço inox e um sistema XYZ que movimenta uma sonda de sinal, são imersos em uma solução de soro fisiológico à 9%. Testes com os modelos animais foram feitos para verificar o funcionamento. Para monitorar o fluxo sanguíneo durante a estimulação um transdutor de ultrassom foi posicionado na artéria femural do animal. Nos testes observou-se estimulações com uma corrente média de 102 mA com 20 ms de duração. A impedância média registrada nos eletrodos foi de 2.600 ohms. O intervalo de tempo medido entre o comando ventricular e o registro na artéria femural estão compatíveis com as proporções físicas do animal. A aplicabilidade do equipamento em humanos requer a implementação de alguns circuitos de proteção adicionais.

(CAPES<sup>1</sup>)

## SISTEMA AUTOMÁTICO PARA DIAGNÓSTICO DE VÍCIOS DE REFRAÇÃO OCULAR

*Liliane Ventura, Sidney J. F. Sousa\*, Jarbas C. Castro*

Instituto de Física de São Carlos - USP

\* Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - USP

*Palavras-Chave*: auto-refrator, erros refrativos oculares, refração automática

Erros refrativos oculares (miopia, hipermetropia e astigmatismo) são determinados automaticamente e objetivamente por projetar um alvo luminoso (anel) na retina utilizando-se um laser de diodo ( $\lambda=850\text{nm}$ ) e analisando a vergência dos feixes luminosos emergentes do olho.

O sistema consiste basicamente em projetar um anel na retina e analisar a luz espalhada através de um detector CCD matricial. A luz emergente do olho é dividida em seis partes (três meridianos) através de uma máscara e de um conjunto de seis prismas. A distância entre as duas imagens proporcionadas por cada um dos meridianos fornece o erro refrativo ocular daquele meridiano. Portanto, é possível determinar o poder de refração em três meridianos diferentes, o que fornece a solução exata do erro refrativo ocular.

A base computacional utilizada para a análise das imagens é a de *Busca Heurística*, que proporciona tempo de cálculos rápido o suficiente para este tipo de medidas.

A forma peculiar do alvo, um anel, proporciona um intervalo de medida mais extenso (-25di a +13di) e também evita que partes da retina sejam irradiadas desnecessariamente.

Medidas em olhos artificiais e em pacientes foram realizadas (utilizando cicloplégicos) e os resultados estão em concordância (precisão de 0,125di e 5%) com as medidas retinoscópicas destes pacientes feitas em consultórios. O tempo de medida estimado para esta avaliação é em torno de alguns milissegundos (tempo apenas de captura da imagem), bastante rápido comparado aos exames tradicionais (em torno de 20-30 min).

## PERDA DE ENERGIA ELETRÔNICA SOB CONDIÇÃO DE CANALIZAÇÃO

*P.L. Grande<sup>1</sup>, J.H.R. dos Santos<sup>1</sup>, M. Behar<sup>1</sup> e G. Schiwietz<sup>2</sup>*

(1) Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, 91501-970, Porto Alegre, Brasil

(2) Hahn Meitner Institut, Gliniecker Str. 100, D-14019, Berlin, Germany

*Palavras-Chave : energy loss, channeling, close-coupling*

A perda de energia de íons energéticos ao longo das direções principais de um cristal tem sido estudada intensivamente durante os últimos anos. Além dos aspectos fundamentais que estão envolvidos no fenômeno da canalização, muitas aplicações tecnológicas, tais como, estudo de superfícies, localização de impurezas, distribuição de defeitos e implantações profundas necessitam de uma descrição precisa da perda de energia eletrônica como função do parâmetro de impacto para diferentes estados de carga do projétil e da distribuição do fluxo iônico dentro do canal. Medidas da perda de energia eletrônica sob condição de canalização como função do ângulo de incidência nos fornecem informações sobre a dependência em termos do parâmetro de impacto da perda de energia eletrônica. Existem poucos experimentos da dependência angular da perda de energia eletrônica sob condição de canalização. Os experimentos existentes foram realizados sem sistemática e em altas energias, onde os processos de perda de energia devido a diferentes estados de carga não são relevantes. Neste trabalho, nós realizamos um estudo sistemático da dependência angular do poder de freamento eletrônico para íons de He canalizados em silício tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. A faixa de energia investigada compreende desde energias intermediárias (500keV) até altas energias (5000keV). Os resultados experimentais são comparados com cálculos teóricos obtidos através do método de canais acoplados. Este método se baseia na resolução não perturbativa da equação de Schrodinger para a obtenção da perda de energia eletrônica para os elétrons de camadas internas como função do parâmetro de impacto. O presente trabalho mostra a necessidade de cálculos não perturbativos para a descrição dos processos de perda de energia de íons canalizados, principalmente para energias intermediárias (em torno do máximo do poder de freamento eletrônico).

(CNPq, FAPERGS)

## OBSERVAÇÃO DIRETA DA MULTIONIZAÇÃO E DA MULTIFRAGMENTAÇÃO ORIUNDAS DA COLISÃO DE AGREGADOS RÁPIDOS COM ÁTOMOS

*Ginette Jalbert, Nelson V. de Castro Faria*

IF-UFRJ

*Bernadette Farizon, Michel Farizon, Michel Gaillard*

*Eveline Gerlic, Roger Genre e Sandrine Louc*

IPN-Lyon (França)

*Palavras-chaves: agregados, multifragmentação, produção*

O conhecimento de agregados atômicos tem-se desenvolvido em várias direções, tanto para os metálicos quanto os de van der Waals. O estudo da fragmentação desses agregados é recente e cresceu principalmente com a construção de fontes de agregados rápidos. O fenômeno de fragmentação é observado em várias áreas do conhecimento e sua importância prática pode ser sentida no fato que cerca de um terço do consumo total de energia no mundo vai para processos industriais de redução de tamanho de objetos. Uma conclusão importante extraída do estudo de fragmentação de objetos os mais diversos, é que algumas características do fenômeno são essencialmente independentes do mecanismo particular envolvido no processo. Conceitos bastante gerais podem efetivamente descrever a fragmentação em seus diferentes aspectos correspondendo à escalas de tamanho bem diversas. O agregado de hidrógeno  $H_n^+$  é um objeto apropriado para estudo da fragmentação, já que é simples, com interação conhecida entre seus componentes, prótons e elétrons. No presente trabalho, utilizando a acelerador de agregados de Lyon (França), nós observamos pela primeira vez a multionização de um agregado de Van der Waals, o  $H_{21}^+$ . Até a ionização quádrupla do agregado foi observada e vários novos canais de multifragmentação descobertos. Além disso, os resultados mostram dois diferentes processos de fragmentação do agregado duplamente carregado  $H_{21}^{2+}$ , com a emissão do dímero  $H_2^+$  ou a emissão do trímero  $H_3^+$ , segundo o rearranjo do agregado após a fragmentação.

## CAPTURA E PERDA ELETRÔNICA DE $C^{3+}$ EM HIDROGÊNIO ATÔMICO

*M. M. Sant'Anna, A.C.F. Santos, G.M. Sigaud, E.C. Montenegro*  
*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - RJ*

*W.S. Melo*

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói - RJ*

*M.B. Shah*

*Department of Pure and Applied Physics, Queen's University of Belfast, U.K.*

*W.E. Meyerhof*

*Department of Physics, Stanford University, U.S.A.*

*Palavras-Chave:* perda, captura, hidrogênio

Foram medidas seções de choque totais de captura e perda eletrônicas, na faixa de energia de 2 a 4 MeV, para projéteis de  $C^{3+}$  incidindo em alvo de hidrogênio atômico. As medidas foram realizadas utilizando o acelerador Van de Graaff de 4 MV da PUC-RJ. O alvo de hidrogênio atômico foi obtido por dissociação térmica em um forno construído para esta finalidade. Nele hidrogênio molecular é injetado em um tubo de tungstênio aquecido por efeito Joule até aproximadamente 2600 K, sendo parcialmente dissociado. O feixe de  $C^{3+}$  atravessa este tubo e os feixes emergentes com diferentes estados de carga são separados por um magneto e detectados em uma segunda câmara. A detecção é feita por um detector do tipo micro-channel plate sensível a posição. Captura e perda eletrônicas, assim como o acoplamento entre estes canais (perda-com-transferência, PT), são analisadas dentro do modelo de partículas independentes. Nas colisões estudadas aqui o processo de antiscreening é um importante mecanismo para a seção de choque total de perda, porém não contribui para a PT. O termo de PT aparece da mesma forma nas seções de choque totais de captura e perda eletrônica e não afeta a diferença das seções de choque totais ( $\sigma_{perda} - \sigma_{captura}$ ). Essa diferença pode ser usada para comparar dados experimentais onde o acoplamento entre estes dois canais é forte com modelos teóricos que não levam em conta este acoplamento.

(CNPq, FINEP e NSF)

## PERDA E CAPTURA ELETRÔNICA EM COLISÕES DE $He^+$ , $C^{3+}$ E $O^{5+}$ EM GASES NOBRES

*Wilson de Souza Melo*

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense*

*Marcelo Martins Sant'Anna, Antônio Carlos Fontes dos Santos, Geraldo Monteiro Sigaud e*  
*Eduardo Chaves Montenegro*

*Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro-RJ*

*Palavras-Chave:* colisões atômicas, perda e captura eletrônica, gases nobres

Foram medidas seções de choque de perda total para íons  $He^+$ ,  $C^{3+}$  e  $O^{5+}$  em He, Ne, Ar, Kr e Xe e captura dos dois últimos nos mesmos gases em energias entre 1,0 e 4,0 MeV. É estudada a dependência em Z da perda e da captura eletrônica no regime de velocidades intermediárias. Durante o processo de perda, os elétrons do alvo podem estar no estado fundamental, blindando o núcleo do alvo, ou participando ativamente da ionização do elétron do projétil, aumentando a seção de choque de perda via o processo de antiblindagem. No primeiro caso, a dependência esperada para a seção de choque de perda com o número atômico Z do alvo seria entre Z e Z<sup>2</sup> de acordo com as teorias de primeira ordem. No modo antiblindagem, a dependência esperada seria aproximadamente linear com Z. Usando  $He^+$  como projétil, verificou-se um efeito de saturação da seção de choque de perda para Z grande, indicando que a contribuição do modo antiblindagem para a perda pode ser tão importante quanto a blindagem. Para os outros projéteis, os canais de captura e perda eletrônica são fortemente acoplados e é necessária uma análise conjunta destes dois canais para interpretar os resultados experimentais. Observa-se uma clara tendência à saturação, para ambas as seções de choque, para Z grande. Por outro lado, a perda mostra um efeito de estrutura pronunciado que se torna mais importante quando a energia decresce. Uma possível razão para isto é a ocorrência simultânea do processo de perda e transferência, que se torna importante no regime de baixa energia e para maiores estados de carga do projétil, afetando fortemente a medida da seção de choque de perda. (CNPq, FINEP).

## ONDAS DE SPINS EM FILMES MAGNÉTICOS CONDUTORES

*N. S. Almeida*

Departamento de Física teórica e Experimental, UFRN  
59072-970 - Natal, RN

*Palavras-Chave:* ondas de spins, condutividade, filmes finos

A teoria de ondas de spins em materiais magnéticos é um dos tópicos clássicos que tem sido tratado teórica e experimentalmente desde muitos anos. Experimentalmente estes modos são investigados através do estudo da ressonância ferromagnética ou por meio do espalhamento Brillouin. No regime de longos comprimentos de onda eles são bem descritos por uma teoria magnetostática independente da forma da amostra. Nos dias atuais o interesse nestas excitações foi ressuscitado como consequência do desenvolvimento de novas técnicas de preparação de amostras as quais têm permitido a preparação de filmes e multicamadas de extraordinária qualidade sobre diferentes substratos. Neste trabalho exploramos a influência da condutividade finita sobre as ondas de spins em filmes ferromagnéticos metálicos. Consideramos o caso em que a propagação é perpendicular a magnetização, a qual é paralela a superfície, e comprimentos de onda longos o suficiente para ignorarmos a influência da interação de troca (exchange). Quando as ondas de spins são excitadas, a magnetização precessiona em cada ponto do sistema (em geral seguindo uma trajetória elíptica) gerando um campo de indução magnética em todo o espaço. Devido a lei de Faraday, este campo de indução dependente do tempo deve induzir um campo elétrico. Devido ao caráter condutor do sistema, correntes deverão aparecer no sistema. A dissipação ôhmica associada com a esta corrente é uma fonte para a largura de linha destas excitações. Mostramos que estas correntes além de amortecerem as ondas de spins são também responsáveis por uma renormalização da relação de dispersão dos modos de Damon e Eshbach encontrados nesta geometria. Apresentamos formas analíticas que descrevem estes efeitos em vários limites. Através do uso do método de funções de Green também mostramos a influência da condutividade sobre o espectro das ondas de spins em vários regimes de comprimento de onda.

(Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq)

## FIELD DEPENDENCE OF DOMAIN WALL RESONANCE IN INTERLAYER COUPLED MAGNETIC MULTILAYERS

*R. L. Stamps\*, A. S. Carriço*  
*Departamento de Física, UFRN*  
*P. E. Wigen*

*Department of Physics, Ohio State University*

*Palavras-Chave:* magnetic multilayers, Neel Walls

We show that the effective coupling between thin ferromagnetic films leads to an attractive potential between domain walls on separate films. We consider the equilibrium and excitations of a pair of superimposed Neel walls, as appropriate for thin uniaxial ferromagnetic films. Frequencies of small amplitude oscillations around the equilibrium position of the walls are found for antiparallel and parallel coupled films. Because the magnetic coupling only acts as a restoring force over regions where the walls overlap, the domain wall resonance frequencies contain information about the magnetic coupling over length scales of the order of a domain wall. Therefore domain wall resonance measurements in coupled films is a promising means for sensitive measurements of the local interfilm coupling. Effects of small applied static magnetic fields are examined, revealing different behaviors for the acoustic and optic domain wall resonance modes. Walls in antiparallel coupled films remain stable and move away from the zero field equilibrium positions, until the field pressure balances the pressure due to the interfilm antiparallel coupling. For small values of applied field strength, compared to the interfilm exchange, the field induced relative displacement of the walls is proportional to the field strength and the intrinsic domain wall width, and inversely proportional to the interfilm effective coupling. The wall profiles distort and the variation of the domain wall width is proportional to the square of the applied field strength. The frequency of the acoustic mode varies linearly with the applied field, whereas the frequency of the optic mode has a quadratic dependence on the applied field strength. Numeric simulations indicate that differences in the anisotropies of the films stabilize a structure consisting of a quasi wall, in the film with larger anisotropy, coupled to a Neel wall in the film of lower anisotropy.

(\*)Permanent address: *Department of Physics, Ohio State University*

## EXCHANGE COUPLING IN Fe/Cu, Fe/Ag AND Fe/Au MULTILAYERS

*Antonio Tavares da Costa Jr., Roberto Bechara Muniz and  
José d'Albuquerque e Castro*  
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (UFF),  
Niterói, RJ, 24.210-340

**Key words:** metallic magnetism, exchange coupling, multilayer systems.

The coupling between layers of Fe in Fe/Cu/Fe, Fe/Ag/Fe and Fe/Au/Fe trilayers is calculated as a function of the thickness of the non-magnetic spacer. The approach is based on the formalism previously developed<sup>1,2</sup> for the problem of coupling in magnetic multilayer systems. The lattice structure in the Fe/Cu case is BCC in the two materials, and the layers have (100) orientation. However, in both Fe/Ag and Fe/Au systems the structure is BCC in the Fe layers and FCC in the spacer. In order to match the lattice parameters, the lattice structure in the non-magnetic layers have the in-plane crystalline axis rotated by  $\pi/4$  with respect to those in the Fe layers. The systems are supposed to have sharp interfaces. In all cases, the numerical results for the coupling are interpreted in terms of the geometry of the spacer Fermi surface, using the stationary phase method<sup>2</sup>. Results are compared with the existing experimental data. We show that in Fe/Cu/Fe the additional long oscillatory period that had been predicted by Bruno<sup>3</sup> does not appear in the coupling.

<sup>1</sup> J. d'Albuquerque e Castro, M. S. Ferreira and R. B. Muniz, *Phys. Rev. B* **49**, R16062 (1994).

<sup>2</sup> J. Mathon, Murielle Villeret, R. B. Muniz, J. d'Albuquerque e Castro, and D. M. Edwards, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3696 (1995).

<sup>3</sup> P. Bruno, *Phys. Rev. B* **52**, 411 (1995).

(CNPq, Finep)

## MAGNETIC RELAXATION AND FORMATION OF MAGNETIC DOMAINS IN ULTRATHIN FILMS WITH PERPENDICULAR ANISOTROPY

Luiz C. Sampaio\*, Márcio P. de Albuquerque, Jair C.C. de Freitas and Fortunato S. de Menezes  
*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas / CNPq, Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Urca,  
CEP:22290-180, Rio de Janeiro, RJ, Brazil*

**Key-words :** domain pattern, numerical simulation, thin film.

We have simulated the magnetic relaxation and the formation of magnetic domains in very thin films with strong anisotropy perpendicular to the film plane. We have used Monte Carlo simulation based on a two-dimensional classical Ising model in a square lattice including the long range dipole-dipole interactions and an external magnetic field. Starting with all magnetic moments aligned, the magnetic relaxation exhibits two distinct behaviors depending on the relation  $\alpha$  between the dipole-dipole and the exchange interactions. For  $\alpha < \alpha_c \cong 0.38$ , the magnetization follows an exponential decay,  $M(t)/M(0) = e^{-t/\tau}$  ( $\tau$  is a relaxation time), and the domain pattern presented in the beginning of the relaxation process is characterized by the nucleation of few domains followed by a rapid growth of the magnetic domain size. For  $\alpha > \alpha_c$ , the magnetization follows a power-law time-decay,  $M(t)/M(0) = a(\alpha, T)t^{-\chi(T)}$  ( $T$  is the temperature), with a demagnetization process associated to the nucleation of many domains at random positions in the film. In both cases, the system relaxes to the ground state which, depending on the value of  $\alpha$ , exhibit a striped structure. With the present model we are able to obtain the energy of domain nucleation  $E_N$  for  $\alpha < \alpha_c$ , despite the complexity which arises with long range dipole-dipole interactions; we have also obtained the  $\alpha$  dependence of the energy of domain nucleation,  $E_N(\alpha)$ .

## O DIFRATÔMETRO DA ESTAÇÃO DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X DO LNLS

SERGIO L. MORELHÃO, VIVALDO L. MELLO JR. e CESAR CUSATIS\*  
*LNLS/CNPq, Campinas - SP; \* Depto. de Física UFPR. Curitiba - PR*

A estação de difração de raios-X do LNLS esta baseada num difratômetro vertical do tipo  $\theta/2\theta$ , com um metro de diâmetro e operando em vácuo de  $10^{-2}$  torr ou na pressão atmosférica, que foi projetado principalmente para as técnicas de difratometria de pó e de múltiplos eixos, visando versatilidade e estabilidade. Uma das partes fundamentais do difratômetro é uma mesa com perfuração matricial e que pode ser acoplada ao eixo  $2\theta$ . Sobre esta mesa podem ser fixados eixos de rotação independentes, projetados com alcance de  $\pm 30^\circ$ , avanço rápido ou lento com resolução  $\approx 0,1$  segundo de arco, nas posições necessárias para realizar difratometria de múltiplos cristais. Vários arranjos experimentais são possíveis para a difratometria de dois e três cristais assim como de amostras policristalinas, utilizando radiação branca ou a monocromatizada pelo monocromador da linha.

Nos testes do protótipo dos eixos independentes, realizados na geometria de dois cristais e com radiação  $W\lambda\alpha$ , ficou demonstrada uma estabilidade equivalente á do sistema monobloco tradicional. e os perfis de linha obtidos, com larguras de alguns segundos de arco, estão de acordo com os calculados.

## MULTIWIRE PROPORTIONAL CHAMBER FOR HIGH COUNTING RATES

*Ademarlaudo França Barbosa<sup>(1)</sup> and Julio Criginski Cezar<sup>(2)</sup>,*

*(<sup>1</sup>)Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150 - 22290-180 Rio de Janeiro, RJ*

*(<sup>2</sup>)Laboratório Nacional de Luz Síncrotron  
Caixa Postal 6192, 13083-970 Campinas, SP*

*Keywords:* x-ray, multiwire, detectors

In view of developing an x-ray detector suited for high counting rate applications, we have attempted to use a wire chamber in which a counting channel is connected to each anode wire. A channel is constituted by a voltage pre-amplifier and a fast discriminator, both developed for this purpose. A prototype with two wires has successfully been tested, indicating that counting rates of up to  $10^6$  counts/s per wire is possible without loss in the linearity relation (absorbed photons versus counted photons). A 30 wires detector is presently under construction. This kind of system shall be in use in situations requiring precise monitoring of intense beams (eg. EXAFS experiments). An upgrade for decoding the X&Y coordinates of absorbed photons is foreseen.

## Protein Crystallography Station at LNLS

*I. Polikarpov, G. Oliva<sup>†</sup>, E.E. Castellano<sup>†</sup>, R.C. Garratt<sup>†</sup>, P. Arruda<sup>‡</sup> and A. Craievich*

LNLS- C.P. 6192 - CEP 13081-970 - Campinas

<sup>†</sup>IFSC -USP - C.P. 369- Sao Carlos

<sup>‡</sup>CBMEG-UNICAMP-C.P. 6109- CEP 13081-970 - Campinas

*Key-words:* protein crystallography, synchrotron radiation

Synchrotron radiation with its high flux and brilliance combined with a tunability over a wide wavelength range make it ideal for applications in protein crystallography studies.

A protein crystallography beamline station is currently designed and will be commissioned at LNLS. The beamline will include a cylindrical elastically bent mirror providing vertical focusing, and bent crystal monochromator, focusing the high flux of the synchrotron radiation in horizontal plane at the position of the sample. The monochromatic radiation will be tuneable between 1.9 Å to 1.2 Å with the optimum wavelength at 1.6 Å.

Diffraction images will be recorded on an Image plate system (MarResearch, Hamburg) to high resolution (up to 1.5 Å resolution). Design of the optical elements and mechanical parts will permit SIRAS data collection on Sm and Eu L-edges and to record anomalous contribution from iodine and uranium atoms.

The beamline set-up will include cooler and chillier of the samples to increase their lifetime, computer facilities for beamline operation, data collection and evaluation. Biochemistry facilities for crystallisation, heavy metal soaks, packing of the crystals and so on will also be available.

These facilities will be set up to serve the national and international user community. The beamline is planned to be brought into operation in August 1996. We hope that the commissioning of the first protein crystallography beamline in Latin America will boost the number of protein structures determined and will increase the general interest from the physics, molecular biology and biochemical research community of Brazil in this area.

## DESCLINAÇÕES EM UMA MONOCAMADA DE GRAFITE: EFEITOS DA CURVATURA NOS ESTADOS ELETRÔNICOS

*Sergio Azevedo, Cláudio Furtado e Fernando Moraes*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras Chave:* grafite, carbono e defeito

Desclinações têm um papel fundamental na construção das diversas formas de carbono bidimensional de grande interesse na atualidade. A introdução de desclinações positivas (anéis de 5 átomos) ou negativas (anéis de 7 átomos) numa monocamada de grafite (formado somente por anéis de 6 átomos de carbono) produz a curvatura necessária para “dobrar” a folha de grafite adequadamente desclinadas com as extremidades identificadas. Em um trabalho recente [Phys. Rev. B 49 (1994) 7697], Tamura e Tsuka estudam a estrutura eletrônica do grafite desclinado levando em conta somente a conectividade dos átomos sem incluir efeitos de curvatura. Eles concluem que anéis de 5 átomos atraem elétrons enquanto que os anéis de 7 átomos repelem elétrons. Um argumento simples, baseado no fato de que anéis de 7 átomos significa extra espaço e anéis de 5 átomos menos espaço em relação ao background de anéis de 6, indica que se deveria esperar um resultado contrário ao dos autores citados: um elétron minimiza sua energia cinética se consegue distribuir sua função de onda sobre uma região maior do espaço. Portanto elétrons, em princípio, deveriam ser atraídos pelos anéis de 7 átomos e repelidos pelos de 5, em conflito com o resultado de Tamura e Tsukada. Neste trabalho, verificamos o argumento acima fazendo cálculos explícitos (usando o método da função de Green). Encontramos que a energia de interação elétron-desclinação no grafite é tipo Coulombiana com a desclinação assumindo uma carga efetiva  $\sim 0.262e$  para anéis de 5 átomos e  $\sim 0.168e$  para anéis de 7 átomos (e é a carga de um elétron).

## A NEW CHARACTERIZATION OF THE BORDONI PEAK AT VERY LOW FREQUENCIES

*Ariel Moreno-Gobbi<sup>(1)</sup>, Mario Marotti<sup>(1)</sup>, José A. Eiras<sup>(2)</sup> and Ada Ghilarducci<sup>(3)</sup>*

(1) Instituto de Física, Facultad de Ciencias, Montevideo, Uruguay.

(2) Departamento de Física, UFSCar, Sao Carlos, SP, Brasil.

(3) Centro Atómico Bariloche, CNEA, Bariloche, Argentina.

*Keywords:* Dislocation, Relaxation, Internal Friction.

The secondary properties of the Bordoni Peak (BP) are not yet well understood. Moreno-Gobbi *et al.* recently pointed out that the relaxation mechanism added to a resonant mechanism can explain the great asymmetry of the BP. Also they reported that the width of the high-temperature BP is 2.5 times a simple Debye peak. This fact may be understood considering a diffusion mechanism in the kink pairs creation process. In order to check the main consequence of the kink diffusion mechanism in dislocation lines, that is the existence of an effective activation enthalpy which depends on the temperature range, a low frequency (1-10Hz) characterization of the Bordoni Peak was made. We present an Arrhenius plot including these new measurements and high frequencies (10-50MHz) ones obtained by Moreno-Gobbi and Eiras, all of them measured on samples obtained from the same crystals. Also, the same thermal treatment was done on all samples. For the low frequencies measurements a sub resonant pendulum was used, which allowed us to plastically deform and to treat thermally the samples “in situ”. Two series of low frequencies measurements were done. In the first one an electro-erosion method was used to cut the samples. These measurements shows an unexpected behavior when the temperature of the sample was varied up from 5K to 290K, presenting an unexpected peak between the first and the second BP, at approximately 60K. This peak, which is not reported in the literature, due perhaps to impurities introduced during the cut of the crystal, also was higher than the main BP at the higher deformation sample. A second sample was constructed cutting it with a diamond disc. The measurements done with the new sample did not show the spurious peak and the temperatures of the BPs were higher than those obtained before.

## SEGREGAÇÃO DE TERRAS RARAS EM ZIRCÔNIA

*Milton Ferreira de Souza*

Depto de Física e Ciência dos Materiais - Instituto de Física de São Carlos  
Universidade de São Paulo

*Dulcina Pinatti Ferreira de Souza*

Depto de Engenharia de Materias - Universidade Federal de São Carlos

*palavras-chave: zircônia, terras-raras, segregação*

Zircônia apresenta três fases polimórficas, monoclinica, tetragonal e cúbica que são estáveis até 1170, 2370 e 2680°C respectivamente. A transformação de fase monoclinica → tetragonal é acompanhada de variação volumétrica de 5% o que impede a obtenção de zircônia policristalina na temperatura ambiente. A eliminação desta transformação, retendo a fase tetragonal ou cúbica na temperatura ambiente, é possível através da dopagem com ítria ou terras raras. Neste trabalho a zircônia foi dopada com ítria e terras raras, tais como Pr, Eu, Er, somando um total de 6, 7 e 8 mol%. As composições também foram preparadas com a adição de 1% em peso de sílica para promover sinterização via fase líquida. As amostras, obtidas por prensagem isostática e sinterização a 1610°C, foram caracterizadas através de microscopia ótica, microscopia eletrônica de varredura, difração de raios-X e espectroscopia de impedância. Foi determinado, nas amostras sinterizadas via fase líquida, que ocorre uma dopagem seletiva, isto é, a distribuição dos ions de terras raras,  $TR^{+3}$ , não é uniforme dentro dos grãos. Quando vistos ao microscópio ótico por reflexão, os grãos apresentam vários anéis coloridos sendo o mais próximo do contorno de grão de cor branca indicando a ausência de ions  $TR^{+3}$ . Portanto, durante o crescimento dos grãos os ions minoritários de terras raras vão sendo incorporados ao grão de  $ZrO_2$  até que a fase líquida contenha somente o ion  $Y^{+3}$  e  $SiO_2$ . Em amostras sinterizadas com menor teor de fase líquida observa-se somente a formação da faixa clara próxima ao contorno de grão. Neste sistema a condutividade elétrica do grão é sensivelmente maior do que em amostras estabilizadas somente com  $Y_2O_3$  sendo os valores próximos daqueles encontrados em amostras de elevada pureza. Em amostras observadas ao MEV, sem tratamento de sua superfície, foi encontrado elevado teor de sílica na superfície. A segregação seletiva dos ions de terras raras explica a formação dos anéis com diferentes concentrações de terras raras. A expulsão da sílica para a superfície ocorre devido a formação de um vidro rico em ítria.

(FAPESP)

## ESTUDO DE ZIRCÃO USANDO ESPECTROSCOPIA DE CATODOLUMINESCÊNCIA E FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X SÍNCROTRON

*M.A.Z. Vasconcellos<sup>1</sup> e Ian M. Steele<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Universidade Federal do Rio Grande do Sul - <sup>2</sup>Universidade de Chicago

*Palavras-Chave: Microsonda Eletrônica, Catodoluminescência, Zircão*

O zircão é um mineral cujas características físico-químicas favorecem fortemente a incorporação de ions de terras raras como impurezas. Esta propriedade acoplada com a capacidade de formar guias de ondas neste material pela técnica de implantação iônica, faz do zircão um sistema com grande potencialidade para utilização como cavidade guia de onda em laser. Isto faz com que a análise espectroscópica do zircão seja necessária para a identificação de possíveis linhas de transição laser. Uma ferramenta recente para este tipo de caracterização é a espectroscopia de catodoluminescência (CL). Esta técnica tem sido largamente aplicada como uma ferramenta analítica, mesmo embora muitas vezes não seja possível determinar as origens da luminescência. Desta forma, este trabalho relata resultados do estudo em grãos de zircão natural oriundos de duas regiões do Brasil, o complexo de Barro Alto de Goiás e o Complexo Socorro (CS) de São Paulo, buscando estabelecer as origens da emissão luminescente observada. Para isto foram utilizadas as técnicas de SXRF (Synchrotron X-Ray Fluorescence) e Espectroscopia de CL. As medidas de SXRF foram realizadas no 'National Synchrotron Light Source' do 'Brookhaven National Laboratory' em 'New York'. A técnica de SXRF foi necessária uma vez que as quantidades dos elementos terras raras nos grãos de zircão está normalmente abaixo do limite de detecção por técnicas como a microsonda eletrônica ou Fluorescência de Raios-X convencional. No NLSL, foram obtidos espectros de fluorescência de Raios-X nos modos WDS (wavelength dispersive spectrometry) e EDS (energy dispersive spectrometry). A faixa de comprimentos de onda, no caso do modo WDS, abrangeu os elementos terras raras. Os espectros de CL foram obtidos na Microsonda Eletrônica CAMECA SX-50 da Universidade de Chicago, equipada com um sistema de aquisição de espectros de CL e porta-amostra refrigerado a baixa temperatura.

Os espectros de CL dos zircões naturais podem ser agrupados em dois tipos. Um padrão de emissão onde as principais linhas de emissão são devidas a presença de  $Dy^{3+}$  e outro associado a presença de defeitos na rede do material. Os resultados mostram também que a intensidade das linhas de emissão depende sensivelmente da energia de aceleração e corrente do feixe.

## Um Modelo Analítico da Transição Frágil-Dúctil

*F. C. Serbena*

Departamento de Física, Universidade Estadual de Ponta Grossa/PR

*palavras-chave:* transição frágil-dúctil, discordâncias, fratura frágil

A falta de ductilidade dos materiais cerâmicos e de certas ligas intermetálicas tem sido um dos principais problemas para sua utilização em altas temperaturas. Estudos da transição frágil-dúctil em diversos materiais revelam que existe uma dependência da temperatura de transição em função da taxa de deformação cuja energia de ativação é igual a energia de ativação relacionada com a mobilidade térmica de discordâncias. Modelos computacionais considerando a dinâmica das discordâncias ao redor de uma trinca tem reproduzido com sucesso as principais características da transição.

Um modelo analítico da transição frágil-dúctil é desenvolvido neste trabalho. Uma trinca sob modo III de carregamento emite um número grande de discordâncias de tal modo que estas podem ser representadas como uma distribuição contínua. O modelo considera diferentes condições de nucleação das discordâncias na ponta da trinca: a transição é gradual se a nucleação é homogênea. Para o caso de nucleação heterogênea, a transição assume uma forma abrupta. Parâmetros tais como o tamanho da zona plástica e o número de discordâncias emitidas são calculados em função da temperatura e da taxa de deformação. A variação da tensão da fratura com a temperatura predita pelo modelo concorda com experimentos realizados em germânio monocristalino. Generalizações acerca do comportamento mecânico de materiais frágeis e semi-frágeis são feitas a partir dos resultados do modelo.

(CAPES, University of Oxford UK)

## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS ÓXIDOS DE METAIS PESADOS À BASE DE ÓXIDO DE TELÚRIO

*A. P. Bispo, N. Aranha and L. C. Barbosa*

Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970, Campinas S.P.

*Palavras-chave:* Nonlinear glasses, tellurite glasses and óptical glass

A óptica não linear adquire a cada dia maior importância, devido a sua aplicação no campo das comunicações ópticas. Com objetivos de encontrar novos materiais para esta aplicação, neste trabalho são sintetizados e caracterizados os sistemas vítreos:  $\text{TeO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TeO}_2\text{-Li}_2\text{O-Bi}_2\text{O}_3$  e  $\text{TeO}_2\text{-Na}_2\text{O-ZnO}$ . Esta escolha deveu-se ao fato destes três sistemas vítreos apresentarem altos índices de refração lineares e conseqüentemente têm grandes potencialidades de serem aplicados nesta área. Amostras destes sistemas com composições variáveis de seus constituintes sofreram processo de fusão em cadinhos de alumina de alta pureza, em forno super Kanthal a temperatura de 850 °C durante 20 minutos. Após este procedimento, amostras na forma de pó e de lâminas sofreram processos de caracterização por difratometria de raio-X, espectroscopia infravermelho e UV-Vis, dilatométrica e através do método de ângulo de Brewster, encontrou-se seus índices de refração na linha do laser He-Ne. Concluiu-se dos dados das caracterizações mencionadas acima, que os vidros produzidos foram de qualidade óptica com altos coeficientes de dilatação térmica, quando comparado com vidros borossilicatos, e o mais importante seus índices de refração que dependeram da matriz vítrea além da composição, foram extremamente altos da ordem de 2,15-2,3. Através da espectroscopia infravermelha, serão levantadas algumas hipóteses relacionadas com a estrutura de cada um destes sistemas vítreos. Por outro lado, pela espectroscopia UV-Vis encontrou-se que o "cut off" situou-se para estes três sistemas vítreos na faixa de 380-400 nm. Serão dadas algumas hipóteses, levando em conta algumas teorias relacionadas com o assunto a respeito destes altos índices de refração lineares e conseqüentemente altos índices de refração não lineares.

(PADCT, FAPESP, FINEP, CNPq, TELEBRAS)

### CRISTALIZAÇÃO DE VIDROS PELA TÉCNICA DTA

M. A. P. da Silva

UNESP - Instituto de Química de Araraquara

B. J. Mokross

USP - Instituto de Física de São Carlos

*Palavras-Chave:* vidros, materiais

Os vidros geralmente são caracterizados a partir da equação de Johnson-Mehl-Avrami (JMA) que fornece dois parâmetros cinéticos. Para melhor compreender o processo de cristalização desenvolvemos um modelo cinético a partir da equação modificada de JMA na qual introduzimos modelos específicos para a nucleação, a velocidade de crescimento dos cristais e a viscosidade. Obtivemos um resultado analítico de integração trivial e que nos permite reproduzir a metade do pico de cristalização localizado na região de baixas temperaturas onde se inicia o processo de vitrificação. É a região de interesse tecnológico e mediante o ajuste de três parâmetros conseguimos bons resultados. Também efetuamos a integração exata da fórmula JMA e reproduzimos os resultados experimentais mediante o ajuste de quatro parâmetros. Neste procedimento fomos surpreendidos pela existência de um parâmetro de grande sensibilidade que na literatura tem sido relegado a segundo plano: é a constante de origem geométrica (que entra na equação JMA elevada à terceira potência) do modelo de Turnbull para a taxa de nucleação. Com o ajuste dos resultados experimentais mediante um modelo teórico estamos em condição de concluir sobre os mecanismos que atuam no processo de devitrificação. Após calcular os parâmetros cinéticos habitualmente citados na literatura (decorrentes da fórmula JMA calculada com taxa de nucleação e de crescimento de cristais constantes com a temperatura) podemos concluir sobre a veracidade dos processos de cristalização comumente associados a estes parâmetros. Outro resultado que pode ser de utilidade tecnológica para o desenvolvimento de vidros é obtido ao ajustar nosso modelo a um pico DTA idealizado e que reproduza as propriedades físicas desejadas do material (p.ex. vidros a base de fluoretos para puxamento de fibras óticas). A reprodução do mesmo, mediante o ajuste dos parâmetros, permitirá concluir sobre as alterações necessárias a serem introduzidas no material (adição de dopantes, variação ou incorporação dos componentes do material) para obter as propriedades físicas desejadas.

## PROPRIEDADES E CRISTALIZAÇÃO DE $\text{LiNbO}_3$ EM VIDROS NIOBATOS

E.B.de Araujo , J.A.C.de Paiva e A.S.B.Sombra

Departamento de Física, Laboratório de Ótica não Linear e Ciência dos Materiais, Universidade Federal do Ceará , Caixa Postal 6030,60450 Fortaleza, Ceará ,Brasil

Palavras Chave: Ferroeletricidade, Dieletricos

Em anos recentes ,vidros contendo  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  tem despertado grande interesse devido a possível aplicação em dispositivos fotônicos e matrizes de fibras ópticas com alto valor para a susceptibilidade não-linear.No entanto , ao contrario de vidros silicatos e fosfatos ,pouco tem sido estudado em vidros niobatos. O papel desempenhado pelo  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  na estrutura vitrea , o numero de coordenação do niobio e a interação com outros elementos na rede vitrea é um objeto ainda em estudo na literatura . Recentemente ,Komatsu \* propos o uso de vidros contendo microcristais ferroelétricos com um novo tipo de vidros ópticos não lineares . Niobato de Lítio  $\text{LiNbO}_3$  e um material ferroelétrico com uma temperatura de Curie de  $1210^\circ\text{C}$  e um alto valor para a susceptibilidade não linear associada a geração de segundo harmonico , sendo largamente usado como dispositivo totalmente optico Neste trabalho descrevemos experimentos aonde vidros niobo-fosfatos a base de lítio na forma  $[\text{xNb}_2\text{O}_5.(0.5-\text{x})\text{P}_2\text{O}_5.0.5\text{Li}_2\text{O}].\text{yFe}_2\text{O}_3$  com  $0 \leq \text{x} \leq 0.5$  e  $\text{y}=0.02$  , foram preparados e estudados usando espectroscopia infravermelho, difração de raios x , condutividade AC e DC com o intuito de compreender o processo de formação dos vidros e vitroceramicas niobiofosfatos. $\text{LiNbO}_3$  e fosfatos de lítio de diferentes graus de complexidade foram obtidos e identificados durante os tratamentos termicos. Estruturas como  $\text{PO}_4^{3-}$  tetraedrico [ara o orthofosfato  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  , dois tetraedros conjugados para o pirofosfato  $\text{Li}_4\text{P}_2\text{O}_7$  e longas cadeias de  $\text{PO}_4^{3-}$  para o metafosfato  $\text{LiPO}_3$  foram detetados em nossas amostras.Os resultados de infravermelho indicam que o crescimento da relação  $\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{P}_2\text{O}_5$  levam o niobio a posições de simetria octaedrica e a consequente formação de  $\text{LiNbO}_3$  . Estes vidros e vitroceramicas contendo microcristalitos de materiais ferroelétricos formados num processo de cristalização poderão ser otimos candidatos para novos materiais com aplicações em óptica não linear. \* J. Non Cryst. Sol. 135(1991)105

## ELIMINAÇÃO DE GRUPOS OH EM AEROGÉIS DE SÍLICA

*Agaldo Monte Teixeira, Adão Antônio da Silva*  
Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia  
Departamento de Física

Palavras-Chave: aerogéis, eliminação, OH

A preparação de materiais vítreos e cerâmicos pelo processo sol-gel vem atingindo um grande desenvolvimento, superando em muitos casos as tecnologias convencionais. Um dos fatores que influenciam a qualidade óptica dos vidros de sílica obtidos pelo processo sol-gel, são os grupos OH. A eliminação destes grupos é uma etapa crítica para obtenção de preformas de  $\text{SiO}_2$  para puxamento de fibras ópticas. O objetivo deste trabalho é eliminar os grupos OH que ficam ligados na superfície e na estrutura dos géis, que não são eliminados com o tratamento térmico antes que os poros sejam fechados. Estamos trabalhando com aerogéis de sílica preparados com TMOS, os quais foram colocados em atmosfera saturada de tetracloreto de carbono ( $\text{CCl}_4$ ) por cinco dias e em seguida submetidos a  $800^\circ\text{C}$  por vinte horas em um forno elétrico FANEM modelo 412. Utilizamos um espectrofotômetro da Perkin Elmer série 780, modelo 783, para detectarmos a presença de OH. Para efeito de comparação fizemos medidas de amostra sem  $\text{CCl}_4$ , submetida a  $800^\circ$  por trinta e seis horas. O espectro obtido da amostra sem  $\text{CCl}_4$  apresentou pico de absorção característico do OH na região de  $3500 \text{ cm}^{-1}$ . Enquanto que o espectro da amostra submetida à atmosfera saturada de  $\text{CCl}_4$  apresentou uma acentuada redução na intensidade do pico. Este resultado nos induz a supor que houve uma substituição parcial dos grupos OH pelo cloro.

(UFMS-CECITEC-CNPq-CAPES)

## UMA DEDUÇÃO RELATIVÍSTICA DA FORMA DO OPERADOR ENERGIA CINÉTICA COM MASSA EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

*F. S. A. Cavalcante*

Departamento de Ciências da Natureza, Universidade Estadual do Ceará  
Faculdade de Ciências e Letras do Sertão Central

*J. Ribeiro Filho, R. N. Costa Filho, V. N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030  
Campus do Pici, 60455-760 Fortaleza, Ceará

**Palavras-Chave:** operador energia cinética, equação de Dirac, massa efetiva

Através do limite não-relativístico do Hamiltoniano de Dirac e considerando a dependência espacial da massa da partícula na transformação de Foldy-Wouthuysen, mostra-se neste trabalho que o operador quântico energia cinética com massa efetiva dependente da posição tem a forma

$$\frac{1}{4} \left[ \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} + \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \right]$$

Este operador é chamado de redistribuído, e foi anteriormente proposto por Li and Khun [1] como uma das possíveis formas para o operador energia cinética com massa dependente da posição. Entretanto, as propriedades de transmissão de um elétron através de uma heterojunção GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As calculadas com esta forma e com o operador energia cinética de BenDaniel e Duke, o mais utilizado entre todos, diferem no máximo por 1% se a existência de regiões interfaciais tão estreitas quanto duas unidades de rede GaAs são levadas em consideração, enquanto para interfaces abruptas esta diferença pode chegar a 20%. Já que as larguras interfaciais de sistemas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As são desta ordem de grandeza pelo menos, o resultado obtido neste trabalho sugere que nenhum experimento pode ser realizado atualmente em hetero-estruturas semicondutoras para determinação da forma do operador energia cinética com massa dependente da posição.

[1] T. Li, K. J. Khun, Phys. Rev. B 47, 12760 (1993).

## EFEITOS DA FREQUÊNCIA DE CICLOTRON NO TUNELAMENTO DE ELÉTRONS ATRAVÉS DE BARREIRAS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As MÚLTIPLAS SUBMETIDAS A CAMPOS MAGNÉTICOS PARALELOS À DIREÇÃO DE CRESCIMENTO

*M. C. A. Lima, H. T. Anyele*

Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão,  
Campus do Bacanga 65080-420, São Luís, Maranhão

*G. A. Farias, V. N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,  
Campus do Pici 60455-760, Fortaleza, Ceará

**Palavras-Chave:** tunelamento, campo magnético, barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

Quando um elétron tunela através de uma barreira semicondutora GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As simples submetida a um campo magnético perpendicular ao eixo de crescimento, a componente circular do seu movimento na direção perpendicular ao eixo de crescimento e cujo raio está relacionado à frequência de ciclotron pode tornar-se importante e modificar certas características do tunelamento. Neste trabalho estudamos os efeitos da frequência de ciclotron no tunelamento de elétrons através de barreiras GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As múltiplas submetidas a campos magnéticos paralelos à direção de crescimento das multi-barreiras. Resultados numéricos são obtidos através da solução da equação de Schrodinger pelo método dos *multisteps*. Mostramos que a frequência de ciclotron faz com que os picos de ressonância na transmissão dos elétrons se desloquem para regiões de energia mais elevada. Os deslocamentos crescem com a intensidade do campo magnético aplicado, embora os deslocamentos ocorram de forma relevante somente quando intensidades de campo superiores a 10 T são aplicadas, e seja dependente do número da barreiras na heteroestrutura. No caso de barreiras múltiplas, a alteração nas características de tunelamento dos elétrons deve-se não só às modificações na altura das barreiras de potencial produzidas pelo campo magnético aplicado, mas também as alterações produzidas nos níveis de energias dos poços que os elétrons utilizam quando tunelam. As modificações nos níveis de energia chegam a ser da ordem de 10 meV para poços com 100 Å de largura e campos magnéticos aplicados da ordem de 10 T.

## TUNELAMENTO DE BURACOS ASSISTIDO POR PLÁSMONS

*Bernardo. R.A.Neves<sup>1</sup>, L. Eaves<sup>2</sup>, T.M. Fromhold<sup>2</sup>, P.C. Main<sup>2</sup>, M. Henini<sup>2</sup> e G. Hill<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Física, ICEX, UFMG, Belo Horizonte, MG

<sup>2</sup> Dept. of Physics, University of Nottingham, Nottingham, Inglaterra

<sup>3</sup> Dept. of Electronic Engineering, University of Sheffield, Sheffield, Inglaterra

Talvez a demonstração mais direta da natureza quantizada das oscilações do plasma seja o espectro de absorção de energia ("energy loss spectrum") de elétrons altamente energéticos injetados num metal, onde picos são observados devidos à excitação de plásmos de "bulk" [1]. Recentemente, um efeito análogo foi observado devido à excitação de plásmos num gás bidimensional (2D) de elétrons no poço quântico (QW) de um dispositivo de barreira dupla (DBD), gerando um pico satélite na curva I(V) do DBD [2].

Neste trabalho, foi investigado o processo análogo àquele, porém para o tunelamento de buracos num DBD dopado tipo-p. Foram observados dois picos-satélites na curva I(V) do dispositivo que foram atribuídos à excitação de plásmos 2D de buracos no QW do DBD. O interesse especial no estudo deste tipo de dispositivo está no fato de que a estrutura de bandas dos estados de buraco no QW ser mais complexa do que aquela para os elétrons. Foi feita uma simulação teórica da curva característica I(V) do DBD que incluía a interação de buracos com plásmos e foi verificada uma significativa contribuição de plásmos intra sub-banda e inter sub-banda para a corrente, identificando os picos-satélites observados experimentalmente. Foi analisado ainda neste trabalho, o efeito de um campo magnético aplicado paralela, ou perpendicularmente, à corrente no DBD. O campo magnético paralelo destrói os picos de tunelamento assistido por plásmos; enquanto que o efeito do campo perpendicular é bastante pequeno. Estes resultados são explicados à luz da quantização adicional dos estados do 2DEG provocada pelo campo magnético.

[1] C.J. Powell and J.B. Swan, *Phys. Rev.* **115**, 869 (1959)

[2] C. Zhang, M.L.F. Lerch, A.D. Martin, P.E. Simmonds and L. Eaves, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3397 (1994)

(CNPq)

## AB INITIO STUDY OF GROUP V ELEMENTS IN AMORPHOUS SILICON AND GERMANIUM

*Pedro Venezuela e Adalberto Fazzio*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* semicondutores, amorfos, dopagem

When group V elements are introduced in tetrahedrally bonded amorphous semiconductors such as Silicon (a-Si:H) and Germanium (a-Ge:H) some interesting effects are observed. These effects are mainly related with transport properties. Nowadays, there is no doubt that impurities like N, P and As can act as effective n-type dopants in these semiconductors. However a reliable microscopic description concerning the behavior of these systems is still missing, particularly in the N-doped cases.

In the present work we report for the first time *ab initio* calculations of the configurational and electronic structure of P-, As- and N-doped a-Si and a-Ge. The calculation procedure is based on two approaches. First, we have used the Monte Carlo method with the interatomic potential developed by Tersoff to generate the a-Si and a-Ge atomic configurations. Then, we have analysed the electronic and structural configuration within the framework of the density-functional theory with the local density approximation. The Kohn-Sham equations are solved using the Car-Parrinello scheme. Large unit cells and pseudopotentials were used and the single-particle electronic orbitals were expanded in plane waves with cutoff energy up to 45 Ry. All systems studied have been relaxed until the Hellmann-Feynman forces were lower than 0.01 eV/Å.

The properties of the impurities in the amorphous supercells was studied in three charge states and in several lattice sites. It is important because in a amorphous system all sites are structurally non-equivalents (they can be, for example, 3-, 4- or 5-fold coordinated sites).

Based on the calculations described above, several interesting conclusions can be drawn. The main conclusion is that the electrical effect of n-type doping is not related only to chemical equilibrium between 3-fold and 4-fold coordinated systems. We show that, for example, the N center in a-Ge has U-negative character.

## COMPLEXIDADE NA DINÂMICA DO CRESCIMENTO DE POLÍMEROS RAMIFICADOS

*Liadir dos Santos Lucena<sup>1</sup>, Joaquim Elias de Freitas<sup>2</sup> e José Soares de Andrade Júnior<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Física Teórica e Experimental da UFRN, Natal, RN 59073-970

<sup>2</sup> Departamento de Matemática da UFRN, Natal, RN 59073-970

<sup>3</sup> Departamento de Física da UFC, Fortaleza, CE 60000

**Palavras-chave:** Sistemas complexos, polímeros ramificados, avalanches

Um modelo de crescimento cinético que propusemos (*Lucena et al, PRL 72, 230- 1994*) para descrever a polimerização ramificada com travamento (pinning) tem se revelado bastante rico em fenomenologia e tem atraído a atenção dos físicos, chegando inclusive a gerar algumas controvérsias pelas suas características inesperadas (veja, por exemplo, *Bunde, Havlin and Porto, PRL 74, 2714 1995*). O sistema apresenta uma complexa criticalidade e fractalidade, como resultado da competição entre vários efeitos: a aleatoriedade intrínseca das cadeias poliméricas longas, o efeito de volume excluído, a ocorrência estocástica de bifurcações e uma desordem do meio representada por obstáculos fixos ou impurezas inertes, distribuídos ao acaso no espaço (equivalente a um ruído congelado). O modelo mostra duas transições de fase cinéticas, a primeira delas separando uma fase de crescimento finito de outra em que o polímero não para de crescer. Esta transição pode tanto ser considerada como uma transição de destravamento (de-pinning), como de auto-destravamento, no caso da ausência de obstáculos no meio. A segunda (*Lucena, da Silva and Roza, in press*) corresponde a uma transição lisa-rugosa e fornece boas indicações ou pistas sobre o processo de formação de cristais poliméricos. Neste trabalho investigamos a dinâmica de crescimento desses polímeros em várias circunstâncias e geometrias, analisamos a rugosidade das frentes de crescimento e testamos a aplicabilidade da Teoria KPZ. As nossas pesquisas revelam novos aspectos da complexidade do modelo, com fortes evidências da ocorrência de avalanches, evolução espontânea para o estado crítico e quebra espontânea de simetria.

(CNPq, CAPES, FINEP/PADCT)

## ESPAHAMENTO POR POLÍMEROS ESTRELA

*Dora Izzo (\*), Carlos M. Marques(\*\*) e E. Mendes(\*\*\*)*

(\*) Instituto de Física UFRJ, (\*\*) Institut Charles Sadron, (\*\*\*) Université Louis Pasteur

**Palavras Chave:** polímeros, estrutura, espalhamento

Uma solução de polímeros estrela constitui um sistema modelo para o estudo de estabilização coloidal. Várias técnicas experimentais têm sido utilizadas para a determinação da estrutura desses sistemas, entre elas as experiências recentes de espalhamento de nêutrons a baixos ângulos fornecem informação que cobre todas as escalas de comprimento,  $0 < q < b^{-1}$  (onde  $q$  é o vetor de onda e  $b$  é o comprimento de Kuhn das cadeias). Entretanto os trabalhos teóricos que consideram soluções semi-diluídas e concentradas só foram capazes de prever comportamentos assintóticos da intensidade de espalhamento  $I(q)$ : nos limites  $q \rightarrow 0$  e  $q \geq \xi^{-1}$ , além da existência de um pico em  $q \sim d^{-1}$ , onde  $d$  é a separação média entre as estrelas. Nesse trabalho consideramos uma solução semi-diluída como constituída por um conjunto de estrelas imersas em solução; a concentração de monômeros na solução e na parte exterior da corona são iguais. Calculamos  $I(q)$  explicitamente, usando alguns resultados conhecidos que descrevem a conformação das estrelas e que foram obtidos através de análise de escala. Obtemos então uma expressão que prevê a intensidade de espalhamento para todos os valores de  $q$ . Algumas aproximações associadas às correlações no sistema foram feitas, essas porém completamente justificadas. Com esse cálculos obtivemos uma previsão inédita, na região onde as estrelas estão correlacionadas com a solução  $I(q) \sim q^{-10/3}$ , de acordo com os resultados das experiências mencionadas acima; os resultados assintóticos conhecidos também são obtidos da nossa expressão.

## FLUTUAÇÕES TÉRMICAS EM SUPERCONDUTORES DE ALTA TEMPERATURA CRÍTICA

*Paulo Pureur*

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS

Inicialmente serão revisados os principais conceitos pertinentes a teoria de flutuações termodinâmicas Gaussianas e críticas nas proximidades da transição normal-supercondutor. Dar-se-á ênfase aos efeitos de flutuações tanto da amplitude quanto da fase do parâmetro de ordem em propriedades de equilíbrio, como o calor específico e a susceptibilidade magnética, e em propriedades de transporte como a condutividade elétrica. A seguir, serão discutidas as peculiaridades próprias aos resultados experimentais nos óxidos supercondutores de alta temperatura crítica. Em particular, serão enfocados os efeitos da anisotropia e da desordem não trivial. Serão também discutidos os efeitos resultantes da aplicação de campos magnéticos no calor específico e no transporte elétrico.

## ESTUDOS DE RESSONÂNCIA DE SPIN ELETRÔNICO (RSE) E RSE INDUZIDA POR LUZ (RSEL) EM DIAMANTE DQR

C.F.O. Graeff, E. Rohrer, C.E. Nebel e M. Stutzmann  
Walter Schottky Institut, TU-München, D-85748 Garching, Alemanha

**Palavras-Chave:** diamante, nitrogênio, defeito

Filmes de diamante crescidos pela técnica de deposição química reativa (DQR), com conteúdo de nitrogênio variando entre 10 ppm e 132 ppm, foram estudados pelas técnicas de Ressonância de Spin Eletrônico (RSE), RSE induzida por luz (RSEL), assim como CPM (*Constant Photocurrent Method*). Com RSE um sinal foi identificado a vacâncias na rede do diamante, com  $g = 2.0028$  e com uma largura pico-a-pico de aproximadamente 4 G. A intensidade desta linha aumenta com o incremento de nitrogênio incorporado ( de  $7 \times 10^{18}$  spins/cm<sup>3</sup> à  $2 \times 10^{19}$  cm<sup>3</sup> com o conteúdo de nitrogênio aumentando de 10 ppm à 132 ppm). Relacionado a tais observações, está um aumento no coeficiente de absorção na região de 4.7 eV medido por CPM. Em amostras de qualidade superior, onde os microcristais são orientados e texturizados, um segundo sinal pode ser observado por RSE, com uma linha central com  $g = 2.0024$  e largura de linha de 0.2 G, e duas linhas satélites oriundas de interações hiperfinas, à aproximadamente 29 G da linha central. Este segundo sinal é identificado como oriundo do nitrogênio substitucional dispersamente distribuído na rede do diamante, também chamado de P1. O sinal com  $g = 2.0024$  pode ter sua intensidade incrementada (3x) pela exposição da amostra à luz ultravioleta. No caso de amostras de menor qualidade, o sinal com  $g = 2.0024$  só é observado após a exposição à luz ultravioleta. O aumento na densidade de spins após a exposição à luz é estável em temperatura ambiente, sendo necessário submeter a amostra a tratamentos térmicos acima de 200 °C para dar início a relaxação dos spins. O processo de relaxação é termicamente ativado, com uma energia de ativação de 1.5 eV. As mudanças na densidade de spins com  $g = 2.0024$  são acompanhadas pelo aparecimento de um ombro no espectro de CPM próximo à região de 1.4 eV.

(ALEXANDER VON HUMBOLT STIFTUNG, FAPESP)

## ANÁLISE DO ESPECTRO VIBRACIONAL DE LIGAS DE SILÍCIO-CARBONO DE COMPOSIÇÃO VARIÁVEL

R.J. Prado<sup>1</sup>, M.N.P. Carreño<sup>2</sup>, M.C.A. Fantini<sup>1</sup>, M.H. Tabacniks<sup>1</sup>, I. Pereyra<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, USP, DFA, CP 66318, 05389-970, São Paulo, SP.

<sup>2</sup> LME, Esc. Politécnica, USP, CP 8174, 05508-970, São Paulo, SP.

**Palavras-Chave :** carbeto de silício, espectroscopia de infra-vermelho

Filmes finos de carbeto de silício amorfo hidrogenado ( $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{H}$ ) obtidos por PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition) são de grande interesse para aplicação em dispositivos semicondutores devido, em parte, à possibilidade de se controlar o seu gap óptico através do conteúdo de carbono nos filmes. Em trabalhos recentes chamamos a atenção para a importância da forma de incorporação dos átomos de carbono nas propriedades de filmes de  $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{H}$  obtidos a partir de misturas gasosas de Silano ( $\text{SiH}_4$ ) e Metano ( $\text{CH}_4$ ) e da relação desta incorporação com as condições de deposição, particularmente, com o fluxo de silano (condição de "starving plasma"). Neste trabalho aprofundamos este estudo, diminuindo a pressão de deposição e expandindo a faixa de concentrações de metano estudada. Para isto, duas séries de amostras foram crescidas : com alto (20 sccm) e baixo (4 sccm) fluxo de silano, variando-se a concentração de metano entre 0% e 97% na mistura gasosa. Os filmes foram estudados através de medidas de absorção óptica, para determinar o gap óptico, de retroespalhamento de Rutherford (RBS) para determinar o conteúdo de carbono. A forma de incorporação dos diferentes grupos moleculares envolvendo carbono, silício e hidrogênio foi estudada através da análise de medidas de espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Os resultados mostram que a baixa pressão (~ 15 mTorr) o fluxo de silano também tem uma forte influência sobre a forma de incorporação do C, Si e H. As duas séries de amostras mostram que o aumento do conteúdo de carbono ocorre, com esse elemento, se incorporando de forma diferente para altos e baixos fluxos de  $\text{SiH}_4$ . Assim, por exemplo, para baixos fluxos de silano observamos uma maior incorporação de ligações  $\text{sp}^3\text{C-H}$  e de ligações Si-C, mostrando que em baixos fluxos os filmes são mais ordenados quimicamente e apresentam uma maior tendência ao carbono se incorporar tetraedricamente.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## DECAIMENTO DA FOTOLUMINESCÊNCIA EM $\alpha - \text{Si}_{1-x}\text{C}_x : \text{H}$

*Lucicleide Ribeiro Cirino e Leandro R. Tessler*  
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP  
C.P. 6165, 13083-970, Campinas, SP  
*luci@ifi.unicamp.br* ou *tessler@ifi.unicamp.br*

**Palavras-Chave:**  $\alpha - \text{Si}_{1-x}\text{C}_x : \text{H}$ , fotoluminescência, semicondutores amorfos.

As ligas de carbeto de silício hidrogenado ( $\alpha - \text{Si}_{1-x}\text{C}_x : \text{H}$ ) apresentam o gap e a energia do pico de fotoluminescência (PL) variáveis em função do conteúdo de carbono  $x$ . O aumento de  $x$  é acompanhado por um aumento na densidade de defeitos que agem como centros de recombinação não-radiativos. Desta forma a eficiência quântica  $\eta$  diminui com  $x$ , até  $x \approx 0.2$ . A partir daí  $\eta$  passa a aumentar com  $x$  até atingir valores comparáveis aos do  $\alpha - \text{Si} : \text{H}$  a baixas temperaturas ( $\approx 30\%$ ) para  $x \approx 0.4$ . Estudamos a cinética de recombinação medindo o decaimento da PL de amostras de  $\alpha - \text{Si}_{1-x}\text{C}_x : \text{H}$  com  $0 \leq x \leq 0.4$  em função da temperatura. Elas apresentam uma distribuição de tempos de vida cujo pico se desloca para tempos mais curtos quando a temperatura aumenta entre 17K e 300K, ou quando  $x$  aumenta. Atribuímos esse deslocamento do pico em função da temperatura a uma redução no tempo de vida não-radiativo efetivo. O deslocamento do pico em função de  $x$  é associado a uma mudança do mecanismo de recombinação, que passa de tunelamento radiativo entre as caudas de banda para recombinação tipo excitônica.

(CNPq)

## TYPE-B HETEROEPITAXY OF RAPID THERMAL ANNEALED $\text{CaF}_2(111)$ FILMS GROWN ON $\text{Si}(111)$ AT LOW TEMPERATURE

*N. Mattoso<sup>a)</sup>, D.H. Mosca<sup>a)</sup>, I. Mazzaro<sup>a)</sup>, W.H. Schreiner<sup>a)</sup> and S.R. Teixeira<sup>b)</sup>*

<sup>a)</sup>Departamento de Física, UFPR, Caixa-Postal 19081, 81531-990, Curitiba, PR, Brasil

<sup>b)</sup>Instituto de Física, UFRGS, Caixa-Postal 15051, 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

**Key words:** Epitaxy, Thin films, Fluorides

Epitaxial insulators on semiconductors have found a wide interest recently. Semiconductor on insulator (SOI) structures, 3D integrated circuits, improved gate as well as optoelectronic devices can all benefit with high quality epitaxial insulating films. The fluorides have specially been considered as good candidates for epitaxial insulators due to their favorable lattice parameters and compatible crystalline structures. The mechanisms of heteroepitaxial growth have to be completely dominated in order to produce materials which can be used by semiconductor industry.

The  $\text{CaF}_2$  fluoride in particular is almost isomorphous to Si. At room temperature the lattice parameter mismatch of both materials is only 0.6 %.  $\text{CaF}_2(111)$  grows on  $\text{Si}(111)$  in two possible orientations. Type-A growth occurs when the  $\text{CaF}_2$  crystallographic orientation matches that of the substrate, while in type-B epitaxy the orientation is rotated by  $180^\circ$  relative to the substrate around the  $\langle 111 \rangle$  axis.

In this work, we present the results on the crystalline quality and orientation of  $\text{CaF}_2$  films deposited on  $\text{Si}(111)$ . The samples were deposited at  $300^\circ\text{C}$  with and without in situ RTA ( $1000^\circ\text{C} - 1\text{min.}$ ). The structural characterization was carried out by x-ray  $\chi$ -scan,  $\omega$ -scan and reflectivity measurements as well as TEM. The results indicate that the in situ RTA changes the type epitaxy from A to B by the possible presence of calcium silicide ( $\text{CaSi}_2$ ) at the  $\text{CaF}_2/\text{Si}$  interface. We also observe by TEM, the large influence of thickness in the films morphology.

(CNPq, CAPES, FAPERGS)

## Espectroscopia de 2-Fótons de Hidrogênio em Armadilha

C.Cesar<sup>1</sup>, D.Fried, T.Killian, A.Polcyn, J.Sandberg<sup>2</sup>, J.Doyle<sup>3</sup>, I.Yu, T.Greytak, and D.Kleppner  
MIT Physics Department

**Palavras-Chave:** espectroscopia, armadilha de átomos, condensação de Bose-Einstein

Com o uso de átomos frios em armadilha magnética nós ultrapassamos as limitações de tempo-de-voe e do efeito Doppler de 2ª ordem abrindo caminho para uma espectroscopia limitada pela resolução natural de 5 partes em  $10^{16}$  na transição 1S-2S em hidrogênio. O campo elétrico do laser induz a transição eletrônica 1S-2S acompanhada por transições entre autoestados da armadilha magnética, ou seja, entre estados de vibração dos átomos na armadilha magnética. Nestas condições, a linha espectral alargada por tempo-de-voe apresenta franjas com resolução limitada pela não-harmonicidade da armadilha, largura de linha do laser, ou pelo pequeno alargamento Zeeman de 5Hz/20uK.

Nosso sistema<sup>4</sup> utiliza amostras gasosas de hidrogênio polarizado a temperaturas entre 40mK e 100uK com densidades típicas entre  $10^{11}$  e  $10^{14}$  cm<sup>-3</sup> e número de átomos da ordem de  $10^{11}$ . Os átomos são excitados por 2mW de radiação laser a 243nm por 10ms após o que se aplica um campo elétrico causando um rápido decaimento de 1-fóton (121nm) que é detectado por uma Microchannel Plate (MCP). Por não estar otimizado para aplicações de metrologia, o sistema apresenta uma baixa eficiência de detecção de  $4 \times 10^{-6}$ .

Obtivemos a mais alta resolução espectral já demonstrada em hidrogênio de  $2 \times 10^{-12}$  limitada pela largura de linha de nosso laser com sinais de 1000 pulsos/s. Este resultado abre caminho para medidas de altíssima precisão para teste de teorias básicas da física<sup>5</sup> bem como para aplicações em metrologia, na definição de novo padrão de frequência. Nosso sistema é capaz de medir temperaturas *in situ* pela largura de linha e tem a sensibilidade de detectar  $10^7$  átomos no estado fundamental da armadilha ao cruzarmos a linha da transição de Bose-Einstein. A espectroscopia de 2-fótons do condensado (em hidrogênio) tem características radicalmente diferente da espectroscopia de 1-photon de condensados em alcalinos, por exemplo<sup>6,7</sup>. Trabalho experimental para diminuir a largura espectral do laser e atingir a condensação de Bose-Einstein está em andamento.

<sup>1</sup>ETFCE; <sup>2</sup>Research Electro-Optics, CO; <sup>3</sup>Harvard University;

<sup>4</sup>C.Cesar, et al., submetido ao PRL (1996); <sup>5</sup>D.Berkeland, et al., PRL 75, 2470 (1995); <sup>6</sup>ver J.Javanainen, PRL 72, 2375 (1994); <sup>7</sup>C.Cesar, MIT PhD Thesis, unpublished

## NONLINEAR SPECTROSCOPY AND OPTICAL PHASE CONJUGATION IN COLD CESIUM ATOMS

José W.R. Tabosa, Sandra S. Vianna and Fernando A.M. de Oliveira  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

**Key words:** cold atoms, magneto-optical trap, optical phase conjugation

Cold atoms provide a medium to perform nonlinear optical experiments in a domain where Doppler and transit broadening can be strongly reduced. In this domain a number of nonlinear optical effects, which are often hidden in thermal atomic vapors due to the velocity average, can be easily evidenced. In this work we have employed a sample of cold cesium atoms obtained from a four-beam magneto-optical trap [1] to study four wave mixing optical phase conjugation and in particular to perform nonlinear spectroscopy in a three level V-type system. We have measured probe beam spectra around the noncycling transition  $6S_{1/2}$ ,  $F=4-6P_{3/2}$ ,  $F'=4$  for different trapping beams intensities. Under the condition of strong trapping beams excitation, the probe beam spectrum clearly reveals the dynamic Stark splitting of the cesium  $6S_{1/2}$ ,  $F=4$ , ground state. We have observed that this splitting scale linearly with the generalized Rabi frequency. The phase conjugate signal, is observed using the standard configuration of degenerate four-wave mixing where a pair of counterpropagating pump beams cross the medium forming a small angle ( $\theta \sim 3^\circ$ ) with the probe beam [2]. Although in atomic vapors four wave mixing around a noncycling transition is usually prevented by optical pumping, four wave mixing spectra were observed both around the cycling  $F=4-F'=5$  and the noncycling  $F=4-F'=4$  transition with reflectivity of order of 1% for moderate levels of pump power. In conclusion we show that cold atoms in a magneto-optical trap is a very appropriate medium to study nonlinear optical effects in atomic systems and specially to investigate four wave mixing using noncycling transitions.

[1] C. Chesman, E.G. Lima, F.A.M. de Oliveira, S.S. Vianna and J.W.R. Tabosa, Opt. Lett. 19, 1237 (1994).

[2] L. Hilico, P. Verkerk and G. Grynberg, C.R. Acad. Sci. Paris, 315, 285 (1992).

(FINEP, CNPq, FACEPE, PADCT)

## ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO DE ESTADOS EXCITADOS UTILIZANDO ÁTOMOS FRIOS: TRANSIÇÃO DE DOIS FÓTONS

*Sérgio R. Muniz, Luis G. Marcassa, Gustavo D. Telles, Débora Milori, Aparecida Tuboy,  
Sérgio C. Zilio e Vanderlei S. Bagnato*

Instituto de Física de São Carlos  
Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* espectroscopia de alta resolução, armadilhas magneto-ópticas, átomos frios

Desde o início do desenvolvimento das técnicas para resfriar e aprisionar átomos neutros, a espectroscopia de alta resolução tem sido uma das principais motivações para o tema. A razão desse interesse é a ausência, nesses átomos, do efeito Doppler (mesmo em ordens superiores). Isso decorre naturalmente desses átomos estarem a temperaturas da ordem de  $\mu\text{K}$ . Além disso, o tempo de interação com a radiação é grande o suficiente para evitar efeitos de alargamento por tempo de trânsito. Entretanto, apesar dessas vantagens, existe relativamente poucos trabalhos na literatura [1] que conseguem explorar toda a potencialidade dessas amostras.

Neste trabalho, apresentamos duas técnicas para determinar a separação da estrutura hiperfina de átomos de Na no estado 5S. O primeiro método monitora a variação do número de átomos em função de um laser de prova, obtendo  $\Delta\nu_{\text{hfs}} = 156.7 \pm 0.9$  MHz. Já no segundo método, utilizamos uma transição de dois fótons para acessar o estado 5S e detectamos os íons formados pelo processo de fotoionização associativa. O resultado para este caso é  $\Delta\nu_{\text{hfs}} = 157.7 \pm 1.1$  MHz, que esta em boa concordância com o resultado anterior e com os melhores valores encontrados na literatura [2].

[1] R. Fox et al - *Opt. Lett.* **18**, 1456 (1993); M. Zhu et al, *Opt Lett.* **18**, 1189 (1993)

[2] P. Tsekeris et al - *Phys. Rev. A* **13**, 2309(1976)

(Fapesp, CNPq e Finep)

## CRESCIMENTO DE *E. COLI* SUBMETIDA A CAMPOS MAGNÉTICOS

*Luiz Fernando C Nascimento*<sup>\*</sup>, *Galdenoro Botura Jr*<sup>\*\*</sup>, *Rogério P. Mota*<sup>\*</sup>

Departamento de Física e Química<sup>\*</sup>, Departamento de Eletricidade<sup>\*\*</sup> - UNESP/Guaratinguetá

**Palavras-Chave:** campos magnéticos, *E. Coli*, metabolismo

Nos últimos 60 anos tem havido um crescimento exponencial de aparelhos elétricos e eletrônicos de uso pessoal e doméstico, bem como a expansão de linhas de transmissão de corrente elétrica. O interesse da ação de Campos Magnéticos ( CM ) sobre o organismo humano vem crescendo, chegando a tentativas de relacionar determinados tipos de cânceres, como as Leucemias, com a exposição a CM, prolongadamente; ação de CM gerados por corrente contínua, por nós estudada, mostrava que campos intensos como 140 Gauss, estimulava o crescimento da bactéria *E. Coli*, quando comparado com campos de 2,5 e 37 Gauss; a mesma *E. Coli* quando submetida a campos de frequência da ordem de 59 e 143 Ghz, apresentava alterações no seu metabolismo. Neste trabalho foram expostas colônias de *E. Coli* cepa C-600, suspensas em meio apropriado, a CM gerado por corrente alternada, da ordem de 21,5 mG, por 24 horas, nas frequências de 100 Hz, 10 KHz e 1 Mhz; para cada frequência foi usado também um tubo "controle" com a mesma quantidade inicial de colônias de *E. Coli*. A cada 30 minutos era medida num Espectrofotometro Micronal B 395, em 550  $\mu$ m, a transmitância óptica dos tubos controle e exposto; a turvação do meio significa crescimento bacteriano. Os resultados obtidos, mostram que o crescimento da *E. Coli*, era maior quando exposta à frequência de 100 Hz se comparado ao tubo controle, ao contrário das outras frequências; por outro lado, quando exposta à frequência de 100 Hz a *E. Coli* turvava mais rapidamente o meio, isto é, crescia mais rapidamente que quando exposta às frequências de 10 KHz e 1 Mhz. Concluímos que em frequências próximas da frequência usual de aparelhos domésticos e hospitalares, o crescimento da *E. Coli* é estimulado ao passo que em frequência maiores, há uma inibição de seu crescimento.

## Análise de Sinais da Atividade de Contração Gástrica por Susceptometria AC

*Miranda, José Ricardo*<sup>†</sup>; *Moraes, Rogério*<sup>†</sup>; *Baffa, Oswaldo*<sup>‡</sup>; *Brant, Ricardo Oliveira*<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Dep. de Física e Biofísica - Instituto de Biociências - Universidade Estadual Paulista-UNESP;

<sup>\*</sup> Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo-USP;

<sup>‡</sup> Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo-USP;

**Palavras Chave:** Biomagnetismo, Traçadores Magnéticos, Estômago.

A medida atividade de contração gástrica (ACG) é um importante parâmetro para análise clínica de diversas anomalias do trato gastrointestinal e pode fornecer informações sobre a fisiologia deste sistema. A medida temporal da ACG foi obtida utilizando-se o método de susceptometria AC. Estudos *in vivo* foram realizados depois de aprovado o protocolo experimental pelo conselho de ética médica da Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto. Um alimento teste contendo 3 g de ferrita ( $MnFe_2O_4$ ) misturada a 100 ml de iogurte de chocolate é ingerido pelo voluntário e com o auxílio de um susceptômetro AC o sinal proveniente dos traçadores magnéticos é detectado. Este método é baseado em dois transformadores de fluxo magnético com núcleos de ar, arrançados na configuração gradiométrica de primeira ordem, sendo um dos transformadores empregado como referencia e o outro trabalhando como transformador de medida próximo aos traçadores magnéticos de alta permeabilidade, que atuam como núcleos externos. O sinal de resposta é detectado por um amplificador tipo, *lock-in*. O sinal de saída é filtrado, digitalizado e arquivado em formato ASCII para posterior processamento e análise do sinal em termos da frequência característica (50 mHz) e filtragem digital. Mediu-se comparativamente a ACG pela técnica de Eletrogastrografia (EGG). Os resultados obtidos indicam uma boa performance na qualidade do sinal da ACG e no valor de sua frequência característica do método susceptométrico frente ao EGG, mostrando ser o método biomagnético uma boa e não invasiva alternativa para observar e estudar a ACG. (CAPES, CNPq, FAPESP)

## SIMULAÇÃO POR AUTÔMATOS CELULARES NO ESTUDO MAGNÉTICO DE MODELOS DE PROPAGAÇÃO GIRATÓRIA ASSOCIADAS A ARRITMIAS CARDÍACAS.

*E. Costa Monteiro, M.P. Correia, Hall Barbosa, C.R., and P. Costa Ribeiro*  
Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, Brasil

*Palavras-Chave:* autômatos celulares, arritmia cardíaca, ondas giratórias

Utilizou-se um programa de autômatos celulares bidimensionais para calcular o campo magnético produzido por dois diferentes modelos para a propagação das ondas giratórias de ativação elétrica no átrio ("leading circle" e "figure eight"), geradas em um plano de células atriais simuladas, gerando-se mapas de isocampos e de isoamplitudes. Consiste de uma grade bidimensional de 50x50 células hexagonais, que podem estar em um entre três estados diferentes: excitadas, refratárias ou quiescentes. O programa considera uma dispersão espacial do tempo de recuperação  $\tau$ , que é o tempo associado com o estado refratário. Em nossos experimentos sintetizados, incluiu-se heterogeneidades nas propriedades eletrofisiológicas, como obstáculos à condução e bloqueios unidirecionais. Para o modelo de "anel", ambas as anomalias estão presentes. Os modelos de espiral simples ou dupla são facilmente induzidos por meio de um bloqueio unidirecional em um segmento de reta adequadamente posicionado no plano de células no início do processo. A magnitude do tempo de recuperação  $\tau$  e sua dispersão espacial determinam a estabilidade e persistência das propagações giratórias. Para a propagação segundo o modelo "anel", os mapas de isoamplitude apresentam um padrão dipolar, com o dipolo equivalente descrevendo uma trajetória circular, independentemente da magnitude e dispersão espacial do tempo de recuperação ( $\tau$ ). Para as propagação segundo os modelos em espiral, contudo, configurações multipolares são frequentes nos mapas de isoamplitude, sendo raramente observados padrões dipolares, principalmente para períodos refratários curtos. Mapas de isoamplitude da componente CA do campo magnético simulado mostram um ponto de amplitude mínima no centro da onda giratória para os modelos de propagação de "anel" e de espiral simples.

## TÉCNICAS DE MEDIDA MAGNÉTICA PARA LOCALIZAÇÃO DE CORPOS ESTRANHOS EM HUMANOS

*E. Costa Monteiro, C. Kelber, E. Andrade Lima, P. Costa Ribeiro, A. C. Bruno, C.R. Hall  
Barbosa, E. Parente Ribeiro e P. Boechat\**

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica, Rio de Janeiro, Brasil  
Hospital Fernandes Figueiras\*, Rio de Janeiro, Brasil

*Palavras-Chave:* corpo estranho, SQUID, fluxgate

Realizou-se a localização tri-dimensional de uma agulha hipodérmica e agulhas de costura em cinco crianças, com propósitos cirúrgicos, utilizando um magnetômetro SQUID. Esta técnica permite a aquisição por computador do mapa de campo magnético em alguns minutos, fornecendo acuradamente a posição espacial da fonte magnética. A redução do tempo de medida e o procedimento mais sistemático torna viável o uso clínico da técnica. Uma mesa digitalizadora foi acoplada a uma cama XY. Desenvolveu-se um programa que permite a aquisição do campo magnético, gerado pela magnetização remanente da agulha, e o seu mapeamento *on-line* em um plano, representando diferentes intensidades de campo magnético por cores diferentes. Após a identificação dos pontos de campo máximo e mínimo, estes foram marcados na pele do paciente com caneta cirúrgica, auxiliado por um feixe de Laser. A partir destes pontos, determina-se o centro da agulha e sua orientação. A profundidade da agulha em relação à pele é calculada a partir da distância entre os pontos de extremos e da razão entre os seus valores absolutos. Para medir a distância entre a cauda do Dewar e a pele do paciente, utilizou-se um feixe de Laser horizontal. Esta técnica pode reduzir por um grande fator o tempo de cirurgia para extração de corpos estranhos magnéticos, e diminuir seu risco de falha, que é geralmente elevado. Em quatro casos o mapeamento permitiu uma fácil localização cirúrgica das agulhas, com precisão melhor que 5 mm. Apesar da eficiência da localização de corpos estranhos com o SQUID, sua utilização em ambiente hospitalar é dificultada pelo alto custo de manutenção. O uso de um sensor de manuseio mais fácil, como um magnetômetro Fluxgate foi implementado com o sensor móvel e paciente fixo. O campo magnético remanente de uma agulha típica é próximo da sensibilidade do Fluxgate, necessitando apenas de pequeno aumento desta magnetização.

## MAGNETOCARDIOGRAFIA INVERSA NA DETECÇÃO DE CORRENTES DE REENTRADA INDUZIDAS EM TECIDO CARDÍACO ISOLADO DE COELHO

Costa Monteiro, E.<sup>1</sup>, Andrade Lima, E.<sup>1</sup>, Ornelas, P.H.<sup>1</sup>, Cruz, R.S.<sup>1</sup>; Picon, A.P.<sup>1,4</sup>, Kühner G.S.<sup>1</sup>, Kelber, C.<sup>1</sup>, Parente Ribeiro, E.<sup>1</sup>, Bruno, A.C.<sup>1</sup>, Costa Ribeiro, P.<sup>1</sup>, Marchesin, D.<sup>2</sup>, Brio, M.<sup>2,3</sup>, Leite, T.T.<sup>2</sup>

Pontifícia Universidade Católica<sup>1</sup>, Rio de Janeiro, Brazil; Instituto de Matemática Pura e Aplicada<sup>2</sup>, Rio de Janeiro, Brazil; Universidade do Arizona<sup>3</sup>, Tucson, USA, in memoria<sup>4</sup>

Palavras-Chave: reentrada, magnetocardiografia, flutter

A possibilidade de se detectar de forma não-invasiva a propagação circular da ativação elétrica no tecido cardíaco durante o flutter atrial humano é de grande interesse clínico. Foi desenvolvido um protocolo experimental que permite estudos controlados da propagação da frente de onda em tecido isolado de coração de coelho através da técnica não-invasiva de detecção do campo magnético gerado pela ativação elétrica cardíaca. Nas preparações pode-se ter sob acurado controle o tamanho do tecido, suas características anatômicas e a posição do plano da amostra em relação ao plano de medida. A arritmia foi induzida experimentalmente por meio de droga (acetilcolina) e estimulação elétrica. As medidas elétricas foram efetuadas com eletrodos extracelulares de vidro. As medidas magnéticas foram realizadas no interior de uma câmara blindada magneticamente, constituída por dois cilindros concêntricos de  $\mu$ -metal. Foi utilizado um magnetômetro SQUID com um único canal acoplado a um gradiômetro simétrico de segunda ordem com 1.5 cm de diâmetro. Medidas sucessivas em diferentes posições ao longo de uma grade centralizada no tecido isolado foram realizadas utilizando um posicionador de coordenadas polares. Mapas de amplitude da frequência fundamental da transformada de Fourier do sinal magnético detectado, assim como do sinal recuperado a partir de seis harmônicos foram estudados para identificar o circuito de propagação do dipolo equivalente de ativação tecidual durante a taquiarritmia. A frente de onda de despolarização descreveu um movimento circular, caracterizando o padrão reentrante como mecanismo subjacente à arritmia. Além da determinação do circuito de ativação elétrica, foi feita sua localização tridimensional através da solução numérica da magnetocardiografia inversa.

## Magnetismo em Formigas *Solenopsis sp*

Darci M. S. Esquivel, Marllia P. Linhares\*, Eliane Wajnberg, Léa J. El-Jaick

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, \*Centro de Ciências do Estado do Rio de Janeiro-RJ

Palavras-chave: formigas, partículas ferromagnéticas, RFM

A presença de material ferromagnético foi observada em diferentes seres vivos. Estudo recente mostrou o efeito do campo magnético sobre o intervalo de tempo gasto por formigas *solenopsis sp* para encontrar o alimento. Os resultados obtidos indicam que existe um mecanismo de orientação magnética, ainda desconhecido, baseado na interação com um material magnético biomineralizado pelas formigas. A ressonância paramagnética eletrônica (EPR) tem sido utilizada para estudos de propriedades de materiais ferromagnéticos. Nós utilizamos a ressonância ferromagnética (RFM) de 4K a 300K para estudar a presença e a estrutura de partículas magnéticas em formigas. Amostras de tórax de formigas lava-pés, maceradas e secas, foram preparadas anaerobicamente. Dois tipos de sinais foram encontrados, caracterizados por linhas largas na região de  $g=9$  e  $g=2$ , cujas intensidades relativas variam de uma para outra amostra. A linha de  $g=9$  é atribuída à presença de um material tipo-magnetita, fortemente sensível à altura e à orientação da amostra na cavidade de EPR. A largura da linha de  $g=2$  aumenta com o decréscimo da temperatura indicando um comportamento característico de partículas superparamagnéticas imersas numa matriz não magnética. Este resultado é reforçado quando se observa o efeito do aquecimento das amostras a 350°C e 450°C por períodos de 20 minutos. O tratamento térmico exhibe uma forte variação espectral na linha de  $g=2$  que passa de uma forma simétrica para uma linha com um pico extra a campo mais baixo depois de aquecida. Esta variação pode ser associada a alterações no tamanho das partículas magnéticas onde existe anisotropia magnetocristalina. Embora a linha de  $g=2$  possa ser também atribuída a moléculas biológicas com agregados de ferro nos seus núcleos, como a ferriúna, a observação da linha de  $g=9$  parece indicar a presença de material magnético em formigas, possivelmente magnetita. A variação térmica desses sinais poderá dar uma estimativa do tamanho dos grãos magnéticos.

## FMR STUDIES OF HONEY BEES

Marília P. Linhares\*, Darci M. S. Esquivel, Eliane Wajnberg, Léa J. El-Jaick  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, \*Centro de Ciências do Estado do Rio de Janeiro-RJ

**Key words:** honey bees, superparamagnetic and magnetite particles, FMR

Living beings are able to perceive the geomagnetic field. Recent studies in honey bees have shown the presence of superparamagnetic (SP) and single domain (SD) magnetite particles in their abdomens. In order to study the magnetic properties of social insects we have carried out ferromagnetic resonance (FMR) measurements of honey bees as a model system. Thorax and abdomen of *Apis mellifera* were dried at 39°C for 21 hr, smashed and kept in the dessicator. In a second step, annealing at 350°C, during 20 minutes were done. Spectra were recorded at room and cryogenic temperatures in the absence of O<sub>2</sub>.

The room temperature spectra of abdomens of honey bees showed signals at low field region, from zero to 3000 Gauss, due Fe<sup>3+</sup> impurities that are sensitive to the position of the sample in the microwave cavity. The  $g=2$  region exhibited a broad signal superimposed to manganese impurities and at  $g=9.0$  a signal signed magnetite-like was present. The temperature dependence of spectra showed that the broad signal at  $g=2$  region appeared above 70K and it broadens as increasing temperatures. From the annealing experiments it was observed narrowing of this signal. It is not clear yet if this signal comes from a magnetic organic material like ferritin or from SP particles. The spectra were also sensitive to the relative orientation of those species with respect to the applied magnetic field. The orientation-dependence of the broad signal is expected when ferromagnetic materials are present in powder samples. In ferromagnetic resonance the effective magnetic field experienced by electrons including the field induced by other magnetic materials in the vicinity. Further experiments are necessary to get a clear figure from the FMR spectra. The experiments showed that electronic resonance spectroscopy was able to detect the magnetite-like material in abdomens of honey bees.

## PARÂMETROS DA ANÁLISE ESPECTRAL DE SINAIS DE ULTRASOM CARDÍACOS DIGITALIZADOS A BAIXA FREQUÊNCIA

*Milton Roque Bugs<sup>1</sup>, Carlos E. Formigoni<sup>2</sup>, Carlos Alberto Peld<sup>3</sup>.*

Departamento de Física e Matemática

Centro de Instrumentação, Dosimetria e Radioproteção - CIDRA-USP

<sup>1,2,3</sup> Faculdade de Filosofia Ciências e Letras da USP - Ribeirão Preto - SP

*palavras-chave* : ultrassom doppler, análise de Fourier, instrumentação médica.

Neste trabalho desenvolvemos um método para observação de sinais de ultrassom doppler (USD), cuja frequência é da ordem de 2.3 Mhz, digitalizando-o à uma frequência de 5 KHz. O objetivo do procedimento é medir parâmetros quantitativos do sinal baseado no efeito de ambiguidade.

Simulações e medidas mostraram que a variação das componentes espectrais para um sinal de características conhecidas é da ordem da frequências de amostragem utilizada.

O método portanto consegue detectar apenas as variações no intervalo de mesma magnitude da frequência de amostragem. O espectro resultante dos sinais de USD mostram variações dos diversos tecidos do corpo (o transdutor foi colocado à 60 ° à esquerda do externo) bem como as variações do fluxo intra-ventricular e intra-atrial. Os movimentos das valvas são visualizadas em picos cujas componentes são sincronizadas com um sinal de ECG digitalizado à mesma frequência. Outros parâmetros podem ser estudados por este método para fenômenos que estejam no intervalo da frequência de amostragem utilizada.

(CNPq<sup>1</sup>, CAPES<sup>1,2</sup>)

## ELABORAÇÃO DE NORMAS TÉCNICAS E OPERACIONAIS EM ESTABELECIMENTOS DE SAÚDE

\*<sup>1</sup>Lorenzini, F.; \*<sup>2</sup>Guerra, A. B.; \*<sup>3</sup>Fuentefria, J. L. B.; \*<sup>4</sup>Hübler, R.

\*<sup>5</sup>Divisão de Vigilância Sanitária - SSMA/<sup>6</sup>Instituto de Física - PUCRS

e-mail: TRIBOCOR@MUSIC.PUCRS.BR

O uso excessivo e inadequado das radiações ionizantes pelos estabelecimentos de saúde podem acarretar em agravos para os trabalhadores, pacientes e indivíduos do público, reduzindo seus benefícios e aumentando a relação risco/benefício. Atualmente, no Estado do Rio Grande do Sul está sendo elaborada uma Norma Técnica e Operacional no Setor de Radiações Ionizantes da Divisão de Vigilância Sanitária - Secretaria da Saúde e do Meio Ambiente, para estabelecimentos que operam com fontes de radiação ionizante, visando melhorar as condições de funcionamento e operacionalidade. Estas Normas são aplicadas em Serviços de Radiologia Médica, Radiologia Odontológica, Medicina Nuclear e Radioterapia, objetivando a otimização da proteção radiológica e melhoria da qualidade dos serviços prestados. Este trabalho originou um documento contendo os requisitos básicos para adequação dos estabelecimentos à legislação vigente, como por exemplo, o cadastramento e o licenciamento. A verificação do cumprimento das exigências é realizada através de inspeções e do preenchimento de roteiros de inspeção específica para cada tipo de estabelecimento. Através das vistorias realizadas constatou-se que 45% estavam cadastrados e 36% estavam licenciados ou em processo para solicitação do alvará de funcionamento. Foi observado que, através da elaboração e aplicação da Norma Técnica e Operacional, houve uma melhora significativa das condições de proteção radiológica dos estabelecimentos visitados. Com base na comparação entre serviços novos e antigos, atualmente exige-se com mais rigor o uso de equipamentos de proteção individual para radiação ionizante e monitoração individual, tornando estes serviços mais seguros para profissionais, pacientes e indivíduos do público. Além disto, o cadastramento possibilita conhecer o universo de fontes de radiação ionizante existentes no Estado do Rio Grande do Sul.

## SIMULAÇÃO DA OTIMIZAÇÃO DE IMAGENS DE RAIOS-X PELA ENERGIA, UTILIZANDO A TÉCNICA MONTE CARLO.

Vitor Chemello, Adelaide de Almeida, Martin Eduardo Poletti  
Departamento de Física e Matemática - FFCLRP/USP

*Palavras-chave:* simulação, imagem radiográfica, Monte Carlo

Em exames com raios-x diagnóstico, a qualidade da imagem é obtida em função dos parâmetros físicos colocados no aparelho de raios-x de acordo com o que se deseja visualizar, isto é, da resposta do detector à radiação, do cuidado na escolha e controle das substâncias utilizadas no processamento (caso o detector seja filme) e do controle de qualidade envolvendo cada uma destas etapas. Visando fornecer este conhecimento a futuros profissionais na área de Radiologia e Física Médica é conveniente construir simuladores que propiciam a visualização da melhoria em termos de qualidade da imagem a partir da manipulação de parâmetros físicos que tem acesso. Com esta óptica, este trabalho tem a finalidade de simular computacionalmente imagens levando em conta a sua otimização quanto a energia utilizada para visualizar materiais com espessuras e tipos particulares. Desta maneira, conhecendo-se o tipo e as dimensões das estruturas a serem analisadas, o operador do aparelho sabe exatamente a energia a ser utilizada. Para obter tais resultados foi utilizado neste trabalho, uma técnica Monte Carlo para a geração e interação dos fótons de raios-x com o "phantom" matemático (simulador do paciente) cujo resultado, que vem a ser uma distribuição de fótons transmitidos por este "phantom", é utilizado para obtenção de uma imagem digitalizada. Esta otimização das imagens é proposta em dois âmbitos: o primeiro analisado matematicamente, através de um algoritmo da razão sinal-ruído em função da energia  $e$ , o segundo, analisado visualmente através de imagens bidimensionais oriundas de um "phantom" com dois materiais distintos (tecido mole e osso). A simulação matemática mostra um máximo na relação sinal/ruído para uma dada energia, que corresponde à energia ótima, que, uma vez utilizada, possibilita obter uma imagem melhor definida em comparação às outras imagens com diferentes energias.

(APOIO FINANCEIRO CNPq)

## DETECÇÃO DE BORDAS EM IMAGENS RADIOLÓGICAS ATRAVÉS DE OPERAÇÕES DE MORFOLOGIA MATEMÁTICA

ANA MARIA MARQUES DA SILVA<sup>1</sup>

CARLOS ANDRÉ AITA SCHMITZ<sup>2</sup>

LORELEY JAQUELINE MOREIRA<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, RS

<sup>2</sup> Serviço de Informática do Hospital Universitário, Universidade Federal de Santa Maria, RS

*Palavras-Chave:* detecção de bordas, morfologia matemática, imagens radiológicas

Técnicas de realce e detecção de bordas são utilizadas no delineamento e visualização de estruturas dentro de uma imagem. Métodos típicos de detecção de bordas utilizam-se de filtros espaciais tais como Sobel, Prewitt e Laplaciano, e baseiam-se na obtenção da derivada das bordas nas direções  $x$  e  $y$ . Apesar destes operadores de detecção de borda produzirem respostas adequadas para bordas bem definidas, eles são muito sensíveis ao ruído da imagem. Assim, tais técnicas dificilmente são aplicadas às imagens médicas, tais como as imagens radiológicas.

Foi desenvolvido um algoritmo para detecção de bordas usando operações de morfologia matemática. A técnica mostrou-se particularmente útil na detecção de bordas de imagens de baixo contraste e alto nível de ruído, tais como as imagens radiológicas. O trabalho foi motivado pela necessidade de avaliação de certas patologias tais como hiperparatireoidismo e crescimento ósseo anômalo, obtidas através da análise de imagens radiológicas da mão. Basicamente, no hiperparatireoidismo o interesse está na análise da rugosidade das bordas das falanges devido à descalcificação dos ossos, enquanto o crescimento ósseo é avaliado através das medidas de área e perímetro dos metacarpos da mão, comparados com os valores normais. A detecção das bordas, em ambos os casos, permitiu um melhor delineamento das estruturas ósseas da mão, de modo que as análises relativas às patologias citadas anteriormente estão sendo realizadas com maior acurácia, proporcionando um diagnóstico confiável.

(Apoio: PICD-CAPES, PIBIC-CNPq/UFSM, FIPE/UFSM)

## **MEDIDAS DE CONTAMINAÇÕES RADIOATIVAS EM AMOSTRAS COLETADAS PRÓXIMO A ÁREAS HOSPITALARES DO ARROIO DILÚVIO.**

Dytz, A. S.; Guerra, A. B.; Lorenzini, F.; Hübler, R.

Instituto de Física - PUCRS. e-mail: TRIBOCOR@MUSIC.PUCRS.BR

A presença de radioisótopos em materiais usados pela população em geral é muito maior do que possa ser imaginado e, o fato de maior gravidade, é o desconhecimento por parte desta população do que esta sendo manuseado e até consumido. A contaminação de alimentos, água e de outros materiais por radioisótopos tem sua origem em diversos fatores, como por exemplo: adubos, rejeitos hospitalares, mineração etc. Sabendo que os Hospitais que marginam o arroio dilúvio, em Porto Alegre, utilizam materiais radioativos para diagnóstico e terapia, e que esses materiais são *fontes líquidas não seladas* (em geral), é possível que uma quantidade desse material radioativo chegue ao arroio junto com os rejeitos hospitalares comuns, na rede de esgoto, pois parte deste material é eliminado pelos pacientes via urina e fezes. Foram coletadas periodicamente amostras da água do arroio dilúvio nas proximidades dos hospitais que trabalham com Medicina Nuclear. As amostras foram analisadas no Laboratório de Técnicas e Medidas Nucleares do Instituto de Física da PUCRS usando-se um equipamento da EG-Ortec acoplado a um micro através de uma placa multicanal que permite identificar as energias dos contaminantes. O trabalho mostra o mapeamento dos níveis de radiação no arroio dilúvio. Estes resultados são comparados com amostras padrões dos radioisótopos usados em Medicina Nuclear e que foram cedidas pelos hospitais.

### **Avaliação Sensitométrica de Sistemas de Imagens Radiográficas**

*Diana Rodrigues de Pina, Thomaz Ghilardi Netto, Sérgio Rocha e Marco Aurélio Côte Brochi*  
Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, SP 14040-901

**Palavras-Chave:** imagem, radiografia, sensitometria

O princípio do radiodiagnóstico consiste no fato de que os raios-x são atenuados em graus diferentes, em tecidos distintos. Por essa razão, as estruturas anatômicas têm distintas opacidades radiológicas, que produzem contrastes radiológicos, ou seja, a imagem radiográfica. Os progressos em radiologia estão estritamente relacionados com o desenvolvimento de novos sistemas de registros de imagem, que possibilitam um aumento na qualidade com baixa dose no paciente. Neste trabalho são apresentadas informações sobre a obtenção de radiografias de tórax, crânio e pélvis de boa qualidade, baseadas na rotina de um serviço de radiodiagnóstico e do conhecimento científico. Serão abordadas questões que vão desde riscos associados às radiografias, escolha do equipamento adequado, até a obtenção de radiografias de boa qualidade. Este trabalho ainda cobre os detalhes da técnica radiográfica e a interpretação dos exames realizados em um tubo de raios-x convencional. Desenvolvemos um sistema mais adaptável à rotina de um serviço de radiodiagnóstico; propomos neste trabalho a padronização de técnicas radiográficas que produzam uma boa imagem para o diagnóstico médico. Para efetuar este trabalho, desenvolvemos "Phanton" homogêneo e utilizamos um método sensitométrico para medir curva característica de filme radiográfico exposto com telas intensificadoras. As técnicas encontradas, foram testadas em um "Phanton" antropomórfico e as imagens obtidas foram avaliadas pelos radiologistas da Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto (FMRP). Vários métodos sensitométricos têm sido proposto por diferentes autores. Adotamos neste trabalho a sensitometria de tempo escalonado. A metodologia mais simples para exposição de filmes que emprega este método, é aquela em que durante a exposição o kVp permanece constante enquanto varia o tempo de exposição no filme.

(Apoio financeiro CNPq)

## CÁLCULO DE DOSE UTILIZANDO MONTE CARLO EM UM EXAME RADIOLÓGICO

*Joseane Fonseca Souza<sup>(1)</sup>; Nivaldo Carlos da Silva<sup>(2)</sup>  
Marco Aurélio Corte Broch<sup>(3)</sup>; Thomaz Ghilardi Netto<sup>(3,4)</sup>*  
(1) Depto Geologia, Física e Matemática - FFCLRP - USP;  
(2) Escola Técnica Federal do Mato Grosso;  
(3) CDIFM da FMRP - USP; (4) CIDRA - USP

*palavras-chaves: cálculo de dose, simulação Monte Carlo, radiodiagnóstico.*

Na década de sessenta, Snyder e colaboradores iniciaram um trabalho pioneiro propondo um simulador antropomórfico (phantom) que descreve matematicamente a distribuição dos órgãos no interior do corpo. Mais recentemente, revisado por Cristy e colaboradores, que incluíram várias faixas etárias. Foram, também propostos dois novos simuladores, por Stabin e colaboradores, que representam mulheres não grávidas e grávidas em cada trimestre da gestação.

A técnica para calcular doses usando simuladores matemáticos apresenta vantagens em relação à medida direta da dose nos seguintes aspectos: os simuladores físicos (phantom) não representam um homem de referência; e o valor de dose média obtida por um dosímetro, colocado num ponto médio do órgão, não representa com fidelidade a dose total recebida pelo órgão. Utilizamos o software ADAO50, para o cálculo do transporte de fótons num simulador antropomórfico masculino (ADAM), tipo MIRD5, utilizando o Método de Monte Carlo, devido à exposição por fótons em um exame típico de radiografia de abdome. A simulação computacional usando o Método de Monte Carlo é possível devido à natureza estatística da interação de fótons com a matéria. Realizamos medidas experimentais da dose nos órgãos do phantom Humanóide através de dosímetros termoluminescentes de Fluoreto de Lítio (LiF). Verificamos que o software apresenta resultado satisfatório principalmente quando o número de fótons é grande, o que se deve à natureza estatística do processo de interações. A comparação dos resultados entre a simulação e os dados experimentais foi satisfatória, validando o processo de simulação. O software possibilita estimar os valores de doses em órgãos, sem que estes sejam expostos à radiação, possibilitando, portanto, simular uma série de situações de exposição.

## ESTUDO DOS PARÂMETROS APLICADOS A TERAPIA FOTODINÂMICA EM CULTURAS DE CÉLULAS CANCEROSAS

*S. Furuzawa\*, Maria A. G. Cardoso\*, Marcos T. T. Pacheco\*, Steven L. Jacques\*\**

\*CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

\*\*Laser Biology Laboratory - M. D. Anderson Cancer Center  
University of Texas - USA

*Palavras-chave: PDT, PP IX, MTF-7*

A terapia fotodinâmica tem sido muito explorada como forma de quimioterapia foto-ativada no tratamento de câncer. Porphirinas tem sido estudadas para obtenção de melhores resultados neste tipo de tratamento. Uma dessas porfirinas é o PPIX que pode ser metabolizada nas células através da administração do 5-ALA. Foram efetuados diversos experimentos em culturas de células cancerosas MTF-7 (adenocarcinoma de rato clonado a partir do 7,12-dimethylbenza-anthracene). Estas células tem  $\alpha$ -MEM (Sigma) como o seu meio de cultura sendo suplementado com 10% de soro bovino fetal. Os resultados mostram que a morte celular observada em culturas de células que receberam somente 5-ALA sem a aplicação da irradiação laser (630nm, 100mJ/cm<sup>2</sup>) é igual a de culturas que não receberam nenhum tipo tratamento. No caso das culturas que receberam somente a irradiação laser, sem 5-ALA, o resultado obtido mostra pequenas variações no nível de sobrevivência celular entre as culturas. O 5-ALA foi administrado (200µg/ml) em diferentes concentrações de células e o resultado obtido, após a irradiação laser, indica um alto índice de morte celular, não mostrando entretanto, variação significativa entre as diferentes concentrações

## ESTUDO DE CRITÉRIOS PARA A DETERMINAÇÃO DA NECESSIDADE DE MONITORAÇÃO PESSOAL NUM HOSPITAL DE GRANDE PORTE

*Mauricio Costa Carreira, Adelaide de Almeida*

Departamento de Física e Matemática - FFCLRP - USP - Ribeirão Preto - SP

*Gian Maria A. A. Sordi*

IPEN - CNEN/SP

*Palavras chave:* radioproteção, monitoração, otimização

A Comissão Internacional de Proteção Radiológica - ICRP iniciou atividades em 1928, desde então tornou-se o principal órgão internacional normatizador em radioproteção. No Brasil esta função é da Comissão Nacional de Energia Nuclear - CNEN. Em nosso país, a monitoração individual das radiações teve início efetivo em 1957 no IPEN-SP, nessa época a leitura dos filmes dosimétricos era trimestral e feita nos Estados Unidos, hoje a monitoração individual é regulada pela CNEN e realizada mensalmente nas instituições que utilizam radiações ionizantes. Neste trabalho faz-se um estudo dos critérios estabelecidos pelas normas nacionais e internacionais com o objetivo de otimizar a radioproteção quanto a necessidade da monitoração individual de trabalhadores. Para isso foram analisados dados da dosimetria pessoal de 1986 a 1995 do Hospital das Clínicas da Faculdade de Medicina da USP-Ribeirão, nos serviços de Radioterapia, Radiologia, Medicina Nuclear e Hemodinâmica, separando-se os trabalhadores pelas suas funções (técnicos, médicos, etc...) e verificando-se em quais serviços e funções as doses são maiores. Estes dados foram comparados a trabalhos anteriores, obtidos de 1973 a 1983. Também foi feito um levantamento do nível de radiação de área relacionando-se estes resultados àqueles de monitoração individual. Os materiais utilizados foram dosímetros individuais de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$  e  $\text{LiF}$  e, para a monitoração de área, dosímetros de  $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$ . As normas guias são as nº 35 e 60 da ICRP e CNEN NE 3.01. A análise mostra que podem ser retirados, de acordo com a ICRP, 80% dos dosímetros pessoais, pois as doses não excedem ou excederão 3/10 dos limites anuais, ou 60% pelas normas da CNEN, pois as doses não excederão 1/10 dos limites anuais. Conclui-se que haverá economia pela retirada dos dosímetros (R\$ 5,00/dosímetro/mês) e nos encargos trabalhistas vinculados ao uso do dosímetro (adicional de insalubridade), justificando a aplicação das normas, principalmente a nº 35 da ICRP.

(Apoio financeiro: CNPQ)

## DETECÇÃO DE MOVIMENTO PALPEBRAR ATRAVÉS DE REDE NEURAL EM SINAIS DE ELETRONISTAGMOGRAFIA

*Carlos Eduardo Formigoni<sup>1</sup>, Carlos A. Pelá<sup>1</sup>, José Fernando Colafêmina<sup>2</sup>*

Departamento de Física e Matemática<sup>1</sup>, Depto. de Neurologia do HC - USP<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Faculdade de Filosofia Ciências e Letras da USP - Ribeirão Preto - SP

<sup>2</sup> Faculdade de Medicina da USP - Ribeirão Preto - SP

*palavras-chave:* eletrônistagmografia, redes neurais, instrumentação médica

Neste trabalho desenvolvemos um equipamento capaz de captar sinais de eletrônistagmografia (ENG). Este equipamento utiliza uma placa de conversão A/D e um sistema amplificador para detecção dos potenciais córneo retinianos. Os movimentos palpebrares são inerentes ao processo da mecânica do olhar. Porém, para a análise dos sinais de ENG bem como para estudo de patologias em oftalmologia é imprescindível detectar e analisar estes sinais. Assim uma rede neural (backpropagation) identifica os movimentos palpebrares dos sinais de ENG, de eletromiografia (EMG) ou eletroencefalografia (EEG) estes dois últimos não sendo objetivo de estudo deste trabalho. A análise dos movimentos palpebrares pode revelar distúrbios do automatismo ocular e suas patologias. Os padrões de treinamento da rede são obtidos de registros feitos com a ajuda do sistema eletrônico e compõem-se de um conjunto de intervalos de registros de ENG, EMG e EEG a intervalos de 80 pontos digitalizados à 200 Hz. A rede é treinada com o conjunto padrão para um erro global de 0,001 que tem se mostrado atender as necessidades atuais dos registros. A saída da rede é integrada a um outro programa que identifica os sinais e separa então os sinais palpebrares, gravando em arquivo para análise posterior. Outra rotina especializada na identificação de sinais de ENG se encarrega então de analisar os outros dados.

(CAPES<sup>1</sup>)

## DETECÇÃO DA PRESENÇA DE RADIAÇÃO $\alpha$ NO FUMO

Guerra, A. B.; Lorenzini, F.; Boanova, L.G.; Krüger, S.; Dorneles, C.;  
Mansur, J.F.; Dytz, A. S. Hubler, R.

Instituto de Física - PUCRS. E-mail: TRIBOCOR@MUSIC.PUCRS.BR

É associado ao hábito de fumar diversos males à saúde. Os agentes maléficis estão comumente relacionados a presença de alcatrão e nicotina, porém pouco se divulga sobre a presença de substâncias radioativas. Contudo, sabe-se que elementos radioativos provenientes do solo, podem se fixar na planta de fumo. Com o objetivo de detectar e comprovar a existência de radioatividade foi realizada uma experiência no Laboratório de Técnicas e Medidas nucleares do Instituto de Física da PUCRS, no qual foi utilizado um detector de estado sólido conectado a um multicanal MCA - ORTEC, para detectar a radiação  $\alpha$  supostamente existente no fumo. O espectro obtido foi comparado com uma fonte padrão de amerício (Am - 241), que serviu de calibração para o equipamento de medida. Foi identificada a presença de vários elementos radioativos no fumo, como por exemplo, tório, urânio e polônio, os quais possuem uma meia vida longa. Os resultados são comparados com os níveis de radiação em amostras do adubo utilizado nas plantações de fumo.

## Controle de Qualidade em Equipamento de Raio-X para Diagnóstico em Pediatria

*Silvana Carvalho de Oliveira e Thomaz Ghilardi Netto*

Depto. de Física e Matemática - FFCLRP/USP

*Palavras-chave:* radiodiagnóstico, pediatria, imagem

A Radiologia pediátrica difere em muitos aspectos da de adultos. Sua maior esperança de vida cria um potencial elevado para que os efeitos nocivos da radiação se manifestem, sendo necessário manter um controle de qualidade nas técnicas e procedimentos usados, de forma a obter uma ótima imagem com a menor exposição possível do paciente. Este trabalho consistiu em um programa de controle de qualidade no Infantskop, da Siemens, equipamento de Raio-X para pediatria, do Hospital das Clínicas, envolvendo Dosimetria e otimização das técnicas para exames de tórax e pélvis. Para fazer a Dosimetria foram utilizadas pastilhas de LiF, calibradas em uma unidade de Raio-X, numa energia utilizada em diagnóstico. Inicialmente foram medidas as doses para estes exames nas seguintes condições normais do serviço: utilização de filme sensível ao azul, e com as técnicas rotineiramente utilizadas. A fase seguinte consistiu na busca das melhores técnicas radiográficas. Para isto, foi inicialmente utilizado um outro equipamento de Raio-X, da Phillips, que possibilitava uma maior variação de mAs, e um "phantom" homogêneo, com a metade das espessuras de um "phantom" para adulto. As melhores técnicas para o Infantskop seriam encontradas igualando-se o rendimento (mR/mAs) e a camada-semi-redutora para os dois equipamentos. Este procedimento foi feito utilizando-se filme sensível ao verde, que estava começando a ser implantado no hospital nesta ocasião. Entretanto, como o mAs mínimo do Infantskop é muito alto, as melhores técnicas foram encontradas, mas não partindo das medidas feitas no equipamento da Phillips. Foram medidas as doses para estas melhores técnicas, e, numa fase final, foi utilizado um phantom com espessuras equivalentes ao homogêneo para pélvis e tórax, que contém situações comumente encontradas em radiologia. A partir das radiografias deste, as melhores técnicas foram comparadas também em termos de contraste, possibilitando uma maior consistência dos resultados obtidos.

(Apoio financeiro CNPq)

## CATETER MONOFIBRA PARA DIAGNÓSTICO UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA POR FLUORESCÊNCIA

*Carlos J. Lima, Renato A. Zângaro, Marcos Tadeu T. Pacheco*  
CEPEDEX - Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.  
tel.(0123)22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP  
E-mail : lope@univap.br

*Palavras-chave: cateter, fluorescência, diagnóstico*

Cateteres à fibra ótica utilizados em técnicas espectroscópicas para diagnóstico de patologia humana podem apresentar diferentes configurações na extremidade distal do cateter. No entanto, os sistemas de detecção utilizados nestas técnicas exigem que, o cateter na sua extremidade proximal obedeça a uma geometria padrão que é invariavelmente determinada pelo uso de redes de difração e consequentemente pelo uso de fendas. Propomos aqui o projeto de um cateter monofibra que permita eficiente acoplamento do sinal de excitação à fibra, eficiente coleta do sinal de fluorescência do tecido, bem como a formatação ótica em fenda do feixe coletado. Na extremidade proximal/excitação é realizado o acoplamento do laser à fibra, que deve ser compatibilizada com a função proximal/detecção, uma vez que fisicamente as duas ocorrem na mesma extremidade. A radiação de excitação é portanto acoplada a fibra ótica através de um prisma, atingindo a mesma com um ângulo de abertura máximo, igual à abertura numérica da fibra. Um laser He-Ne com potência de 1mW é acoplado a uma fibra ótica de 600µm de núcleo e abertura numérica de 0,1. A eficiência de acoplamento obtida é de 75%, e a de coleta é de 1,1%. Um sistema ótico baseado em lentes cilíndricas garante a formatação do feixe sob forma de fenda, favorecendo seu acoplamento ao monocromador.

(UNIVAP)

## REDUÇÃO DO TEMPO DE ANÁLISE DE SINAIS RAMAN E DIAGNÓSTICO DE TECIDOS BIOLÓGICOS VIA FILTRAGEM POR SOFTWARE

*M. A. da Silva\*, O. Saotome\*, V. Borgest, R.A.Zangaro, M. Tadeu T. Pacheco*  
CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.  
tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP  
E-mail : lope@univap.br

\*Departamento de Eletrônica Aplicada, Divisão de Engenharia Eletrônica - ITA  
CTA - ITA - IEEA - CEP 12228 900, SJCampos, SP  
e-mail: osaotome@netvale.com.br

*Palavras-Chave: sinais biológicos, filtragem digital, espectro Raman*

A espectroscopia Raman vem obtendo grande destaque como ferramenta no diagnóstico de má formações em tecidos humanos, no entanto sua utilização em experimentos *in vivo* exige que o tempo de coleta do sinal Raman seja minimizado, mantendo-se a relação sinal/ruído. A otimização deste processo deve permitir que tempos de coleta do sinal Raman da ordem de dezenas de milissegundos possam revelar a natureza do material analisado. Para tal, é investigado neste trabalho filtros digitais que possibilitem a otimização da relação sinal/ruído, mediante a alteração de  $f_c$  e ordem do filtro com uma implementação em DSP ADSP21020. Como resultado observou-se que: um filtro Butterworth de ordem 2, passa-baixas, com  $f_c=0.1*(f_{amostragem})$ , reduz satisfatoriamente o ruído de altas-freqüências; enquanto que um Butterworth passa-altas com a mesma ordem e  $f_c=0.001(f_{amostragem})$ , remove 90% da fluorescência produzida no tecido. Com este método, pode-se observar que um sinal adquirido em 1s pode ter seus picos de interesse reconhecidos em 6,5 ms, com uma qualidade comparável a um sinal adquirido em 100s. Conclui-se que, é possível recuperar sinais mais rapidamente, soando-se o tempo de aquisição e tratamento.

(UNIVAP)

## ESTUDO COMPARATIVO DA EFICIÊNCIA DE CAPTAÇÃO DE ENERGIA ENTRE UM CATETER MONOFIBRA E MULTIFIBRA

*Carlos J. Lima, Renato A. Zangaro, Marcos Tadeu T. Pacheco*  
CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.  
tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP  
E-mail : lope@univap.br

*Palavras-chave: cateter, fibra ótica, endoscopia*

Um dispositivo importante em endoscopia laser é o cateter de fibras óticas. Este dispositivo deve apresentar alta capacidade de captação da radiação espalhada, permitindo um diagnóstico preciso da patologia estudada e, um bom acoplamento da fonte de excitação. O cateter tipo multifibras (CMF) é formado por fibras de 200 $\mu$ m de diâmetro de núcleo, enquanto o cateter monofibra (CFU) utiliza uma fibra de 600 $\mu$ m de diâmetro. Para coleta de radiação utilizou-se um laser de He-Ne, e um difusor, observando-se que o CFU apresentou uma melhor captação de energia. Esta melhoria se deve a área útil de captação e a geometria de coleção. A eficiência de captação de energia (h), definida como a energia coletada, dividida pela energia que incide sobre o tecido, depende da distância da fibra ao tecido. Para uma distância nula, isto é, quando a extremidade da fibra toca o tecido, o CMF apresenta um valor de  $h=0,5\%$  e para o caso do CFU,  $h=1,1\%$ . A eficiência de captação de energia, no caso de CFU, é 2,1 vezes maior do que aquela obtida para o CMF. Este resultado deve-se aos fatores F e G, onde F é a relação entre as áreas de seção reta de cada cateter, enquanto G é o fator de captação de energia, definido pela distribuição espacial da radiação na superfície da amostra. Esta distribuição espacial é função da difusividade da radiação no interior do tecido. No caso deste trabalho,  $F=1,88$  e  $G=1,16$ , onde o valor de G é obtido através dos resultados experimentais. (UNIVAP)

## THERMAL CUMULATIVE EFFECT IN CORONARY ARTERY TISSUES AND ITS INFLUENCE IN BIOCHEMICAL COMPOUNDS

*Landulfo Silveira Junior, Sokki Sathaiah, Marcos Tadeu T. Pacheco*  
Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP, São José dos Campos, SP, Brasil  
CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.  
tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP  
E-mail : lope@univap.br

*Key Words: raman spectroscopy, thermal effect, human coronary artery*

Raman Spectroscopy (RS) has becoming a powerful technique for biochemical compounds analysis. Near IR RS has the advantage of reduced fluorescence interference in human samples. Therefore, by using IR laser sources, thermal sample degradation can lead to changes in the biochemical structures of tissues under the intense excitation focused laser beam. This study aims the determination of biochemical changes induced by exposure time and laser power and find safer laser power density and energy for *in vivo* NIR RS human arteries. An argon ion laser pumps a Ti:sapphire laser for generation of excitation light at 785 nm. The sample is irradiated and proper collection optics/notch filter is used for signal collection onto a spectrometer. A LN<sub>2</sub> CCD detector reads and a microcomputer stores Raman signal. Tissue exposure to laser beam were made according to the following parameters: laser power equal to 200 mW and time exposure ranging from 100 s to 400 s. Results show strong energy exposure dependence, appearing as an overall intensity decreasing among all spectra and peak relative intensity changes also. We found background or low frequencies differences, it can be attributed to fluorescence photobleaching, that reduces the observed emission spectrum in a broadband fashion in normal samples. Atheromatous samples show peak relative intensity changes mainly at 1332  $\text{cm}^{-1}$ , 1442  $\text{cm}^{-1}$  and 1665  $\text{cm}^{-1}$  due to lipid molecules. A background (due to fluorescence) difference is also observed. (UNIVAP)

## **AVALIAÇÃO DA RESPOSTA EM FREQUÊNCIA DE TRANSDUTORES DE PRESSÃO E FLUXO EMPREGADOS NA ÁREA DE FISIOLÓGIA RESPIRATÓRIA.**

*P. L. de Melo e M. M. Werneck*

*Programa de Engenharia Biomédica - COPPE/UFRJ*

**Palavras-chave:** mecânica ventilatória, transdutores, resposta em frequência

Uma importante fração dos parâmetros clínicos que são determinados direta ou indiretamente na área de fisiologia respiratória, é realizada a partir de medidas empregando transdutores de pressão e fluxo. No entanto, estes transdutores podem induzir erros importantes na avaliação destes parâmetros em função de problemas relativos a resposta em frequência. Cada tipo de ensaio efetuado requer transdutores com resposta em frequência adequada, observando as recomendações das associações médicas ligadas a área (ACCP, 1983; ATS, 1979). Assim, podemos perceber claramente a importância de realizar uma análise detalhada da resposta em frequência destes transdutores, de modo a desenvolver práticas que venham a minimizar os erros citados. Neste trabalho, foram avaliadas as curvas de resposta em frequência de transdutores de uso comum à área; três tipos de transdutores de pressão (Honeywell 163PC, Celesco LCVR e Elema) e dois tipos de transdutores de fluxo (Fleisch e Silverman), acoplados a diferentes tubos de conexão. As curvas de resposta em frequência foram avaliadas até uma frequência de 120 Hz, muito superior a maior frequência necessária aos ensaios normais. Esta análise foi efetuada utilizando um gerador de sinais servocontrolado, construído especialmente para este trabalho, e um analisador de espectro. Os resultados evidenciaram os erros derivados da resposta em frequência em função do modelo de transdutor utilizado do tipo de conexão pneumática empregada. Para os transdutores de pressão, utilizando um mesmo tipo de conexão, foram obtidos melhores resultados com o transdutor piezoelétrico (Honeywell 163PC), seguido do tipo de relutância variável (Celesco LCVR), enquanto o transdutor capacitivo (Elema) apresentou maiores deficiências. No caso dos transdutores de fluxo foi observado um melhor desempenho no transdutor tipo Silverman. No que se refere as conexões, observou-se que a resposta dos transdutores melhora a medida que estas se tornam mais curtas e rígidas. Estas conclusões confirmam os resultados previamente reportados na literatura. Finalmente, concluímos que foi desenvolvido um sistema adequado a avaliação da resposta em frequência de transdutores de pressão e fluxo até 120 Hz. Foram obtidas diversas curvas que podem ser utilizadas como referência nos ensaios e foi elaborada uma metodologia que visa minimizar os erros induzidos pelos transdutores.

## **CATÉTER À FIBRA ÓTICA COM VISADA LATERAL PARA DIAGNÓSTICO DE ATEROMAS *IN VIVO* UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA RAMAN**

*A. de Jesus, Carlos J. Lima, L. Silveira Junior, R. A. Zângaro, M. Tadeu T. Pacheco,*

**CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão**

**UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.**

**tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP**

**E-mail : [lope@univap.br](mailto:lope@univap.br)**

**Palavras-Chave:** *cateter, espectroscopia Raman, diagnóstico in vivo*

O diagnóstico de ateromas em coronárias pode ser obtido *in vivo* através da técnica de Espectroscopia Raman utilizando cateteres multifibras. Para o caso específico da aplicação *in vivo*, um catéter à fibra ótica guia a radiação laser até o tecido. Em cateteres com visada frontal, onde a radiação emerge no sentido longitudinal da fibra ótica, a radiação não atinge frontalmente a parede coronariana, prejudicando a aplicação desta técnica. Apresenta-se aqui o desenvolvimento e caracterização de um catéter com visada lateral, onde a radiação guiada pela fibra é refletida por um espelho posicionado à 45° em relação ao eixo longitudinal da fibra. Através da reflexão total, este espelho pode ser construído na própria fibra, permitindo a excitação frontal da parede da artéria e a coleta do respectivo sinal Raman. Utilizou-se uma concepção de cateter denominada por "seis em torno de uma", o qual apresentou uma eficiência de coleta da ordem de 0,5%. O catéter é constituído por uma fibra central responsável pela guiagem da radiação de excitação e por seis fibras que circundam esta primeira, e que coletam o sinal Raman. As fibras utilizadas têm diâmetro de núcleo igual à 200µm, e o cateter um diâmetro total de 1,1mm, possibilitando sua inserção em coronárias. A junção das fibras na face distal do cateter é realizado com um adesivo ótico biologicamente compatível, onde o índice de refração é de 1,41, permitindo o casamento de índices e reduzindo as perdas por espalhamento. (UNIVAP)

## SISTEMA PARA MEDIR INTENSIDADE ACÚSTICA DE TRANSDUTORES UTILIZADOS EM MEDICINA

*Jesuel Antonio Dias (Depto. Física e Matemática - FFCLRP - USP - Rib. Preto -S.P.) e João Sinézio de Carvalho Campos (Depto. Física-IGCE-UNESP, Rio Claro, S.P.).*

Palavras-chave: Ultra-som, intensidade acústica, transdutor.

Apresenta-se um sistema para medir a intensidade acústica ( $W/cm^2$ ) desenvolvida por transdutores utilizados nas diversas áreas da medicina, dentre estas, diagnóstico e terapia. Com o objetivo de auxiliar na calibração e aferição dos transdutores.

O sistema é constituído por: uma balança de braço móvel, tanque acústico, suporte para transdutor, gerador elétrico de sinal e um alvo de geometria planar em forma de "V". O alvo é imerso no interior do tanque contendo água e preso a um dos braços da balança. As ondas emitidas pelo transdutor incide verticalmente para baixo na parte superior do alvo, isto causa um desequilíbrio da balança. Para restabelecer o equilíbrio, massas aferidas são adicionadas no outro prato. De acordo com uma calibração prévia destas massas (curva de calibração) obtém-se o equivalente em intensidade ultrassônica do transdutor. Medidas mostraram uma boa linearidade da intensidade acústica em função das massas, dentro do intervalo de  $10 mW/cm^2$  até cerca de  $160 mW/cm^2$ , como também mostraram bom acordo com resultados da literatura.

Apoio financeiro: CNPQ E CAPES

### PROJETO E DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE AQUISIÇÃO E PROCESSAMENTO RÁPIDO DE ESPECTROS RAMAN

*Osamu Saotome\**, Ivando S. Diniz, Renato A. Zangaro, Marcos Tadeu T. Pacheco  
CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão  
UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.  
tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP  
E-mail : lope@univap.br

\*Departamento de Eletrônica Aplicada, Divisão de Engenharia Eletrônica - ITA  
CTA - ITA - IEEA - CEP 12228 900, SJCampos, SP  
e-mail: osaotome@netvale.com.br

*Palavras-Chave: sinais biológicos, filtragem digital, espectro raman*

A aplicação *in vivo*, de diagnóstico via espectroscopia depende da redução do tempo de processamento do sinal espectral. Neste trabalho é descrito o desenvolvimento de um sistema baseado em um processador digital de sinais de alto desempenho do tipo ADSP 21020, que permite otimizar o tempo de processamento do sinal obtido a partir de espectros Raman. O sistema comercial de detecção, aquisição e tratamento do sinal é da Princeton Instruments. O sistema dedicado desenvolvido no CEPEDEX/UNIVAP, opera em paralelo com o sistema da Princeton, para tal foi implementado uma derivação do sinal logo após sua passagem pelo conversor analógico digital. Para garantir a integridade do sinal, um buffer é instalado entre o sistema Princeton e o sistema dedicado, permitindo que o sinal proveniente do conversor AD seja conectado ao porto paralelo de 16 bits da placa do DSP. Uma vez na memória rápida da placa DSP, o sinal passa por um filtro digital e é processado por um algoritmo de reconhecimento de padrões de espectros Raman. Os resultados obtidos até o momento demonstram que processadores digitais de sinais de alto desempenho permitem processamento em tempo real com maior velocidade, possibilitando sua aplicação em sistemas clínicos para diagnóstico *in vivo*. (UNIVAP)

## MONTAGEM E CARACTERIZAÇÃO DE UM SENSOR PIROELÉTRICO UTILIZANDO O POLÍMERO PVDF

*Glauber Fernando Furlan*

(Departamento de Física e Matemática-FFCLRP-USP-Ribeirão Preto,S.P.)

*João Sinézio de Carvalho Campos*

(Departamento de Física - IGCE-UNESP, Rio Claro,S.P.)

**Palavras-Chave:** Piroeletricidade, imagem, PVDF

Apresenta-se neste trabalho a montagem e caracterização de um sensor piroelétrico para as frequências do infravermelho, utilizando-se como sensor o polímero polifluoreto de vinilideno (PVDF). Os materiais piroelétricos são utilizados como sensores de temperatura graças a sua característica de produzir um sinal elétrico em resposta a mudanças na polarização devido a variações de temperatura do material produzidas pelo fluxo radiante incidente. O sistema é composto por um transdutor de PVDF montado sobre um dissipador de calor, um "chopper", um circuito eletrônico (seguidor de tensão/casador de impedância) e um milivoltímetro AC. A radiação antes de chegar ao sensor é modulada mecânicamente pelo "chopper", e após detetada pelo sensor é processada pelo circuito eletrônico e monitorada pelo milivoltímetro AC. As radiações foram geradas por uma fonte puntiforme (lâmpada de flash focalizada por uma lente) colocada a cerca de 0.5 metro do sensor. Para tal configuração, utilizando-se um sensor com área de  $30 \text{ mm}^2$  e uma frequência de operação do "chopper" de 10 Hz obteve-se uma responsividade em voltagem de 40 V/W. O sistema foi montado sobre uma plataforma deslizante, a qual permitiu mapear ao longo das coordenadas cartesianas (X,Y) e assim obter uma imagem plana do objeto emissor de radiação. As aplicações deste aparato estão voltadas tanto para a área médica, na produção de imagem em diagnóstico, quanto para técnicas não invasivas em medidas de temperatura de órgãos em seres humanos, principalmente quando submetidos às terapias.

(Apoio Financeiro: CAPES)

## PAULING'S RESONATING VALENCE BOND THEORY OF ANIONIC $Li_n^-$ CLUSTERS

José Rachid Mohallem, Andréa Dias Quintão e Reinaldo Oliveira Vianna  
Departamento de Física - ICEX - UFMG  
Rachid@tapajos.fisica.ufmg.br

**Palavras chave:** Valence bond, metallic clusters, anionic clusters

In a previous work [J. R. Mohallem, R. O. Vianna, A. C. Pavão and R. McWeeny, submitted] we show that the Resonant Valence Bond (RVB) theory of metals, developed by Linus Pauling [Nature (London) 161, 1019 (1948)] must be applied to properly describe the electronic structure of metallic clusters in the valence bond approach. It implies that new covalent structures other than the common Kekulé ones must appear in the wavefunction. These *Pauling* structures are obtained by allowing the atoms in a metallic system to receive an extra electron in the *metallic* orbital and to make an extra covalent link with a neighbour,

becoming negatively charged. The RVB theory applied to small anionic  $Li_n^-$  clusters gives a description of them that is at the same time simple and accurate. The RVB wavefunction is compact, dominated by few structures and the ground state energies are the most accurate obtained so far.

CNPq, Fapemig, Finep.

## ESTIMATING CORRELATION ENERGY OF ATOMS AND DIATOMIC MOLECULES WITH NEURAL NETWORKS

Geraldo Magela e Silva, Paulo Hora Acioli and Antonio Carlos Pedroza  
Departamento de Física, Universidade de Brasília,  
70 910 900 Brasília - DF - Brazil

**Palavras-Chave:** correlation energy, atoms, molecules, neural network

The accurate determination and experimental determination of the total energy, therefore the correlation energy, is extremely difficult. An evidence of this difficulty is that exact correlation energies are only known for the atoms He through Ar ( $Z=18$ ). The electronic correlation energy of heavy atoms and diatomic molecules is estimated using a back-propagation neural network approach. Artificial neural networks has become a powerful tool for researchers in recent years. The back-propagation method, a supervised learning method, is accomplished using the known exact results of the electronic correlation energy of several atoms and diatomic molecules. The recall rate, i.e., the performance of the net on recognizing the training set is about 99%. The correctness of values given to the test set, prediction rate, is at the 95% level. We generate a table for the electronic correlation energy to all the neutral atoms up to radon (Rn). We also estimated the correlation energy for all the important families of diatomic molecules. The advantage of using neural networks is that it can extrapolate naturally to atoms and molecules with a large number of electrons without prohibiting computational implications.

(CNPq)

## O OSCILADOR DE MORSE FORÇADO

Gabriel Amorim Costa  
Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos

Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-chave:* oscilador de morse, fotodissociação, hamiltoniano dependente do tempo

O mecanismo de fotodissociação (processo pelo qual uma molécula se dissocia quando submetida a um intenso campo de radiação oscilatório dependente do tempo) tem despertado o interesse de cientistas há já algum tempo. Modelos teóricos para o problema são de difícil resolução por se tratar de um sistema dependente do tempo. O presente trabalho representa um esforço no sentido de conseguir um modelo teórico que represente o sistema molécula-campo satisfatoriamente.

A molécula alvo de estudos aqui é o ácido fluorídrico (HF), pois para moléculas diatômicas já existe um modelo empírico que descreve seus modos vibracionais satisfatoriamente bem: o Potencial de Morse, proposto em 1929 por P. Morse, que, embora unidimensional, nos proporciona, com razoável precisão, as funções de onda e respectivas energias dos estados ligados permitidos à molécula quando em seu estado natural. Para estudar o caso em que a mesma é submetida a um campo de radiação dependente senoidalmente do tempo escrevemos a eq. de Schrödinger com o potencial de Morse e mais um termo devido ao campo. Soluções para esta eq. diferencial são então procuradas expandindo a função de onda na base das auto-funções do oscilador harmônico, com coeficientes dependentes do tempo. O sistema resultante de equações diferenciais acopladas envolvendo os coeficientes é resolvido por um programa, testado primeiramente no caso em que não há perturbação: dessa forma têm-se a garantia de que as soluções terão a precisão desejada, podendo-se então fazer a propagação da função de onda com o campo externo oscilatório. Este método demonstra a viabilidade de obter soluções para um problema dependente do tempo para um potencial molecular importante, soluções essas que podem vir a ajudar na compreensão das ligações moleculares.

(CNPq)

## CONSTRUÇÃO DA REPRESENTAÇÃO $[1,1,0]$ DO GRUPO QUÂNTICO $Sp(6)_q$ .

Fernando Fagundes Ferreira, José Eduardo M. Hornos.  
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369,  
CEP 13560970, São Carlos-SP.

*Palavras Chaves:* álgebras de Lie, grupos quânticos, representações irredutíveis, código genético.

Os grupos quânticos têm sido intensamente investigados tanto de um ponto de vista matemático quanto em aplicações envolvendo problemas de física estatística bem como de física molecular. As representações desses grupos podem ser construídas a partir de técnicas tradicionais e apresentam novidade se o parâmetro de deformação  $q$  é raiz da unidade, e neste caso podem ocorrer perda da irredutibilidade e conseqüentemente alterações nas dimensões dessas representações. Recentemente foi proposto por Hornos, J. um modelo evolucionário para o código genético baseado na representação  $[1,1,0]$  de dimensão 64 associada ao grupo  $Sp(6)$ . Nesse trabalho são obtidos as degenerescência do código genético a partir de um processo de quebra de simetria na cadeia  $Sp(6) \supset Sp(4) \otimes SU(2) \supset SU(2) \otimes SU(2) \otimes SU(2)$ . O código genético só pode ser plenamente obtido se uma hamiltoniana de quebra de simetria for imposta. Todas as representações irredutíveis das álgebras de Lie de dimensão 64 foram investigadas e os resultados demonstraram que a citada representação é a única que consegue reproduzir as degenerescência do código genético. Destarte coloca-se o problema da reanálise classificação de Cartan a procura de grupos quântico com representações de dimensão 64 que possam gerar o código genético. Este projeto visa construir a representação  $[1,1,0]$  do grupo quântico  $Sp(6)$ . Primeiramente vamos estudar as representações no caso clássico, a seguir introduziremos as deformações quânticas nas relações de comutação envolvendo os geradores associados às raízes simples. Finalmente estudaremos especificamente o caso em que  $q$  é raiz complexa da unidade à procura de novas reduções dimensionais que não aparecem no caso clássico. Inicialmente nossa atenção está voltada para a álgebra especial unitária tridimensional, pois esta mostrou uma variedade de fenômenos que de acordo com o nosso conhecimento não são bem entendidos. Num programa mais amplo, todas as versões  $q$ -deformadas das álgebras clássicas devem ser sistematicamente investigadas.

## INSTABILIDADES E PROBLEMAS DE CONVERGÊNCIA DE SOLUÇÕES HARTREE-FOCK

Dardenne, L.E.\*; Makiuchi, N.\*; Malbouisson, L.A.\*; Vianna, J.D.M.\*

\* Departamento de Física, Universidade de Brasília  
\* Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

*Palavras-Chave* : soluções Hartree-Fock, instabilidades, convergência SCF.

Neste trabalho apresentamos um estudo de instabilidades, multiplicidade e problemas de convergência de soluções Hartree-Fock (HF) para os sistemas diatômicos. LiH, CH, C<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>. Foram realizados cálculos *ab initio* utilizando o procedimento SCF puro, com regras de ordenamento *aufbau* e *não-aufbau*, e o Método Algébrico (MA) para a resolução das equações de Hartree-Fock-Roothaan (HFR) e Hartree-Fock-Pople-Nesbet (HFPN). Restringimos nosso estudo às classes de funções monodeterminantis conhecidas na literatura como TICS e ASDW. No estudo de estabilidade das múltiplas soluções encontradas utilizou-se matrizes de estabilidade derivadas através do Método de Máximos e Mínimos de funções. Utilizou-se, para soluções pertencentes à classe TICS, o critério de convergência desenvolvido por Stanton em 1981 para estabelecer a relação entre a convergência do procedimento SCF puro e a classificação das soluções obtidas quanto ao tipo de ponto de extremo na sua respectiva classe de funções.

Em todos os sistemas estudados verificou-se a presença de mínimos somente associados à regra de ocupação *aufbau* e associados às soluções de mais baixa energia. Todas as soluções encontradas com ocupação orbital *não-aufbau* foram classificadas como Pontos de Sela e na sua grande maioria encontradas via Método Algébrico. Para os sistemas LiH, CH encontrou-se para cada distância interatômica apenas uma solução classificada como mínimo enquanto que para os sistemas C<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> encontrou-se no máximo duas e três soluções, respectivamente, classificadas como mínimo para cada distância interatômica.

Chegou-se à conclusão de que em cálculos SCF puros convergidos, com regra de ordenamento *aufbau*, as soluções obtidas não são obrigatoriamente classificadas como mínimos, contrariamente à afirmações presentes na literatura. (CNPq)

## ESTUDO DE PSEUDOPOTENCIAIS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS E SUA APLICAÇÃO EM SEMICONDUTORES II-VI

R. Miotto e A. C. Ferraz

Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*palavras-chaves*: pseudopotenciais, semicondutores II-VI, estrutura eletrônica

Os semicondutores II-VI foram, por muito tempo, considerados materiais "promissores" para a fabricação de instrumentos de emissão de luz visível, até que o surgimento de técnicas de crescimento epitaxial, como o "Molecular Beam Epitaxy" (MBE) e o "Metalorganic Vapour Phase Epitaxy" (MOVPE) permitiram o desenvolvimento não só de novas formas de crescimento, como também de dopagem.

Apesar dos esforços na área experimental, poucos estudos teóricos de primeiros princípios estão disponíveis na literatura em se tratando destes compostos. Esta escassez de estudos deve-se a uma característica marcante dos compostos binários II-VI: a presença de orbitais *d* no meio da faixa de valência. Como a maior parte dos métodos de primeiros princípios utiliza a expansão em ondas planas, ao evitar-se tratamento dos estados *d* como parte da faixa de valência, obtém-se uma grande redução no esforço computacional, em contrapartida, ignora-se a contribuição dos elétrons do orbital *d* nas ligações químicas podendo causar problemas na determinação das propriedades físicas destes compostos.

Em nosso estudo, fazemos um cálculo de energia total, utilizando o formalismo do funcional da densidade e os métodos de pseudopotencial de primeiros princípios de norma conservada introduzidos por Bachelet, Hamann e Schlüter (BHS); Hamann, Schlüter e Chiang (HSC); Vanderbilt (Van) e Troullier e Martins (TM). Em nossos cálculos fazemos um estudo sistemático da influência dos orbitais  $3d^{10}$  do Zinco e  $4d^{10}$  do Cádmio, quando estes são tidos como parte da valência, na estrutura eletrônica dos compostos II-VI. Finalmente, observamos a influência do raio de corte do pseudopotencial, não só no tamanho da base de ondas planas, bem como na descrição dos orbitais mais profundos.

## Determinação do Estado Fundamental do Monocarbeto de Cálcio.

*Agostinho Serrano e Sylvio Canuto.*  
Instituto de Física da USP.

*Palavras-Chave:* Teoria de Muitos Corpos, Simetria, Constantes Espectroscópicas.

Com a descoberta, tanto no espaço interestelar como em laboratório, do monocarbeto de silício(SiC), conjecturou-se a existência de vários outros monocarbeto; em especial de alcalinos-terrosos, tais como o BeC, o MgC e CaC. devido à abundância relativa dos mesmos como subproduto de reações de fusão nuclear no interior de estrelas. O Estudo teórico destas moléculas tornou-se de grande interesse, em particular a determinação da simetria do estado fundamental e suas propriedades espectroscópicas, havendo uma longa disputa entre estados tripleto e quinteto.

Neste trabalho nos dedicamos a cálculos de alta precisão usando teoria de muitos corpos(MBPT e Coupled-Cluster) e bases 6s4p2d1f/10s6p2d1f para o carbono e 8s6p2d1f/14s11p2d1f para o cálcio a fim de tentar determinar de forma conclusiva seu estado fundamental. Durante a etapa pós-SCF "congelamos" apenas o orbital 1s do carbono e os 1s e 2s do cálcio para o cálculo dos efeitos de correlação eletrônica.

Os cálculos a nível de SCF, MBPT(2), MBPT(3) e MBPT(4), mostraram uma competição entre estes estados. Apenas após usarmos o método CCSD(T) concluímos qual seria o estado de mínima energia desta molécula, e, conseqüentemente suas constantes espectroscópicas, de grande utilidade para identificação desta molécula por métodos de radioastronomia.

Analizamos a existência de outras soluções das equações de Hartree-Fock com quebra de simetria, referente ao estado tripleto, que apresentava diferença significativa no valor numérico da energia do estado fundamental em relação à solução sem quebra de simetria.

Finalmente estudamos as propriedades elétricas e óticas desta molécula, objetivando obter os valores da polarizabilidade e da primeira hiperpolarizabilidade, respectivamente,  $\alpha$  e  $\beta$ , por meio do 'Método do Campo Finito', a fim de determinar a intensidade infravermelha e atividade Raman desta molécula.

(CNPq, FAPESP, CAPES)

## CÁLCULOS DE POLARIZABILIDADES DE ÍONS NEGATIVOS

*Renato Medeiros, Marcos A. Castro e Orlando A. V. Amaral*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás

*Palavras-Chave:* ânions, propriedades elétricas, polarizabilidades

Existe uma grande variedade de fenômenos físicos que podem ser descritos com o auxílio de polarizabilidades. Entretanto, devido a escassez de resultados experimentais para esta propriedade, a obtenção de valores teóricos tornou-se altamente necessária. Polarizabilidades estáticas de dipolo e quadrupolo para os íons negativos esféricos,  $F^-$ ,  $Si^-$  e  $Cl^-$ , foram calculadas usando os métodos de teoria de perturbação de muitos corpos (MBPT) e coupled cluster (CC). No nosso melhor nível de aproximação, CCD+ST(CCD), os resultados obtidos para a polarizabilidade de dipolo foram, respectivamente, 15.5, 145.5 e 36.4 a.u.. Para a polarizabilidade de quadrupolo os valores obtidos foram  $1.98 \times 10^2$ ,  $2.48 \times 10^3$  e  $3.92 \times 10^2$  a.u.. A polarizabilidade de quadrupolo também foi calculada para os íons  $B^-$ ,  $C^-$  e  $O^-$ . Os resultados encontrados para a componente  $C_{zz:zz}$  foram,  $1.24 \times 10^4$ ,  $1.76 \times 10^3$  e  $4.15 \times 10^2$  a.u., respectivamente. Para os sistemas não esféricos,  $B^-$  e  $O^-$ , os resultados para a componente anisotrópica,  $C_{xy:xy}$ , são respectivamente,  $7.50 \times 10^3$  e  $1.54 \times 10^2$ . Em todos os casos mencionados o papel desempenhado pela inclusão de correlação eletrônica se mostrou de fundamental importância.

(CAPES, CNPq)

## DESCRIÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DOS AMINOÁCIDOS NO MODELO ALGÉBRICO PARA A EVOLUÇÃO DO CÓDIGO GENÉTICO

*Ligia Braggion, José Eduardo Martinho Hornos.*

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369,  
CEP 13560-970, São Carlos, SP.

*Palavras Chave:* modelo algébrico, álgebras de Lie, código genético.

Recentemente foi proposto um modelo para evolução do código genético baseado na teoria das álgebras de Lie e no conceito de quebra espontânea de simetria. A teoria foi construída a partir de uma procura sistemática de simetrias que se ajustassem às degenerescências do código genético. Todas as álgebras simples classificadas por Cartan foram investigadas com a exigência da existência de uma representação irredutível de dimensão 64 associada ao códon que codificam os vinte aminoácidos fundamentais e o codon de terminação. Os resultados mostram que somente a álgebra simplética  $SP(6)$  em sua cadeia maximal que contém a álgebra  $SP(4) \times SU(2)$  que por sua vez se decompõe em  $SU(2) \times SU(2) \times SU(2)$  consegue reproduzir corretamente as degenerescências do código. A fim de verificar a efetividade do modelo foi construído um operador semelhante as hamiltonianas dos modelos algébricos em física nuclear e molecular, compostos pelos operadores de Casimir que caracterizam as álgebras e suas subálgebras. Ele contém automaticamente as degenerescências corretas e possuem vários parâmetros arbitrários. Reconhecendo que a polarizabilidade dos aminoácidos é uma propriedade biológica fundamental foram ajustados os parâmetros a partir da otimização do desvio quadrático médio entre os valores calculados e observados. Esse projeto visa verificar a adaptabilidade de um conjunto de propriedades físico-químicas compilados por Nakai, K. Kidera, A. e Kanehisa, M. ao modelo algébrico a partir da tentativa de reprodução dos dados experimentais a semelhança do que foi feito para a polarizabilidade. O projeto pressupõe preliminarmente um estudo da teoria das álgebras de Lie e suas representações irredutíveis e das propriedades básicas do código genético. Será desenvolvido um modelo para o cálculo, via otimização dos parâmetros dos operadores de Casimir. Finalmente serão hierarquizadas as propriedades físico-químicas dos aminoácidos a partir da adaptabilidade à simetria simplética.

## SOBRE A OBTENÇÃO DE MÍNIMO GLOBAL EM HIPERSUPERFÍCIES DETERMINADAS PELO FUNCIONAL DE HARTREE-FOCK-ROOTHAAN

*Angelo Marconi Maneiro & José David M. Vianna*

Departamento de Física - Universidade de Brasília - DF

*Palavras-Chave:* mínimo global, hiperplano tangente, Hartree-Fock-Roothaan

A determinação de um mínimo global para o funcional de Hartree-Fock-Roothaan (HFR),  $E[\Psi] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$  ( $|\Psi\rangle =$  determinante de Slater) continua sendo um problema de interesse na literatura especializada. Como é conhecido, as equações de (HFR) são condições necessárias para determinar um extremo do funcional  $E[\Psi]$ , mas não o caracteriza como mínimo, máximo ou ponto de sela. A física de átomos e moléculas está interessada no mínimo global. As propostas existentes na literatura visam determinar esse mínimo varrendo toda a hipersuperfície determinada pelo funcional  $E[\Psi]$ . Neste trabalho apresenta-se um algoritmo computacional que dispensa essa varredura. O método baseia-se: (i) no método algébrico de resolução das equações de (HFR) proposto por Malbouisson e Vianna [1] (ii) no conceito do hiperplano tangente (definido através dos vínculos funcionais - condição de ortonormalidade) e (iii) no método de classificação de pontos de extremos (Magela e Silva et al.) [2]. O algoritmo permite determinar, em princípio, se dado um conjunto de mínimos da hipersuperfície  $E[\Psi]$  no espaço dos coeficientes LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) ainda existe algum mínimo menor que aqueles que se encontram no conjunto dado, usando para isto a análise de interseção do plano tangente com a hipersuperfície. O método no presente estágio aplica-se a sistemas de camada fechada e os resultados obtidos para sistemas diatômicos estão coerentes com os valores existentes para a energia. [1] L.A.C. Malbouisson & J. D. M. Vianna, J. Chim. Phys. (1990)87,2017; [2] Magela, G. S.; Malbouisson, L. A. C. & Vianna, J. D. M., J. Math. Chem. (1995)17, 347

(CNPq)

## FUNÇÕES DE ONDA PARA O ÁTOMO DE LÍTIU EM COORDENADAS HIPERESFÉRICAS

*José Paulo D'Incao e Prof. Dr. José Eduardo M. Hornos*  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave* : quatro corpos, coordenadas hiperesféricas, representação mista

O problema quântico não relativístico de quatro corpos tem recebido nos últimos anos uma atenção muito especial. O desenvolvimento de técnicas matemáticas e computacionais tornou viável a obtenção de resultados para a equação de Schrödinger. Essa classe de problemas inclui o átomo de Lítio, o qual é desenvolvido neste projeto sob o formalismo hiperesférico, devido ao sistema ser altamente correlacionado. Partimos primeiramente para análise da parte angular do nosso problema e posteriormente da de Spin e da radial. Inicialmente o problema é desenvolvido independentemente de princípios de simetria de modo que a função de onda espacial obtida ( radial  $\otimes$  angular ) não obedece o Princípio de Exclusão de Pauli. A partir da análise das funções de Spin vemos que as funções de nosso interesse, Spin total  $1/2$ , carregam uma representação mista irredutível do grupo de Permutação  $S_3$  com relação a troca de partículas, de modo que ao compormos estas com as funções espaciais somos obrigados a impor que estas últimas carreguem a mesma representação mista irredutível do grupo  $S_3$ , em relação à troca das posições eletrônicas  $r_1$ ,  $r_2$  e  $r_3$ . Pois pode-se demonstrar que se fizermos o produto de Kronecker de duas representações irredutíveis, onde uma delas é uma representação mista, só obteremos uma representação anti-simétrica se a outra também carregar a mesma representação mista. Logo assim fazendo obtemos uma função de onda anti-simétrica e que portanto satisfaz o Princípio de Exclusão de Pauli. A determinação da base espacial que porta a representação mista desejada é feita a partir do uso dos Operadores de Projeção contidos na Teoria dos Grupos Finitos. Tendo então em mãos as funções com a simetria correta partimos para análise da parte radial através das chamadas Curvas de Potencial, possibilitando assim a determinação da energia do estado fundamental e suas excitações.

( FAPESP )

## UMA ABORDAGEM SEMI-ALGÉBRICA PARA O ESTUDO DA EVOLUÇÃO TEMPORAL DO MOVIMENTO NUCLEAR EM SISTEMA MOLECULARES

*Tarcisio Marciano da Rocha Filho e Marco Cezar Barbosa Fernandes*  
Departamento de Física - UnB  
email: marciano@helium.fis.unb.br

*Palavras-chave*: dinâmica quântica, álgebra de Lie, álgebra dinâmica

O estudo da dinâmica quântica da parte nuclear de moléculas tem suscitado grande interesse nos últimos anos. No entanto os métodos atualmente disponíveis têm permitido tratar problemas com poucos graus de liberdade, o que na prática significa estudar moléculas, com dois, três e no máximo quatro átomos, congelando alguns graus de liberdade. O presente trabalho propõe uma nova abordagem para o estudo de sistemas mais complexos sem que o custo computacional se torne proibitivo. Nosso método se baseia na abordagem de Alhassid e Levine para o estudo da evolução temporal da matriz densidade. Impondo então que sua forma funcional é preservada pela evolução temporal, o operador de evolução é então um elemento do grupo dinâmico do sistema, obtido a partir da álgebra dinâmica formada pelos operadores básicos que formam a Hamiltoniana. Até o presente momento os trabalhos que utilizam esse método têm se restringido a sistemas onde os graus de liberdade quânticos são sempre aproximados por um potencial quadrático. No nosso trabalho estendemos o método para casos em que a álgebra dinâmica do sistema é infinita. Para tomar o método de aplicação prática faz-se necessário a introdução de esquemas de aproximação: o operador de evolução corresponde a um elemento do grupo dinâmico, sendo seus parâmetros de grupo determinados por um sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares. Escrevemos tal sistema como um sistema finito desacoplado, perturbado por termos contendo os parâmetros correspondendo aos demais operadores da álgebra. Mostramos que é possível truncar o número infinito de termos de modo a tornar o problema realizável computacionalmente, seguindo um critério de tempo de estabilidade sob a ação da perturbação. Nosso método é ilustrado aplicado-o ao sistema  $H+H_2$  colinear, obtendo-se numericamente a evolução temporal do sistema.

## FORÇAS DE DISPERSÃO NA INTERAÇÃO APOLAR DO RADICAL CICLOPENTADIENIL COM O DÍMERO DE NITROGÊNIO

C. Cunha e Sylvio Camuto

Departamento de Física dos Materiais e Mecânica  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* dispersão, espectroscopia, *ab-initio*

O termo de dispersão de London ou de van der Waals é de enorme interesse para a discussão das forças inter-moleculares de longo alcance. Um exemplo clássico é o dímero de Berílio que só é ligado em alto nível de correlação. As propriedades espectroscópicas do sistema  $(C_5H_5):N_2$  são manifestações de efeitos de correlação e portanto se apresentam como um sistema de bastante interesse. Interações de longo alcance (tipo van der Waals) são muito importante para entendermos, por exemplo, o efeito de solventes não-polares. Neste trabalho analisamos o comportamento da energia de ligação, do espectro óptico e das constantes espectroscópicas do radical ciclopentadienil crescido em uma atmosfera de nitrogênio, mais especificamente do  $(C_5H_5):N_2$ . Nossos cálculos são baseados em técnicas de orbitais moleculares *ab-initio*. O método de Hartree-Fock foi utilizado na determinação da geometria molecular para o dímero de nitrogênio e para o ciclopentadienil, já na determinação da geometria do  $(C_5H_5):N_2$  e da energia de ligação incluímos correção de efeitos de correlação em alto nível e foram executados através de teoria de perturbação de Møller-Plesset. Todos estes cálculos são feitos com um conjunto base padrão 6-311G+ (*double-zeta sp* mais funções difusas, tanto para o C e N como também para o H). No caso do espectro de excitação óptica utilizamos também o programa semiempírico conhecido como ZINDO para calcularmos a força de oscilador com suas respectivas intensidades.

(CNPq e FAPESP)

## CÁLCULO DE FREQUÊNCIAS DA BENZOFENONA E DA BENZOFENONA-d<sub>10</sub> PELO MÉTODO COMPUTACIONAL MM-2.

Kumiko Koibuchi Sakane, Darwin Bassi e Flávio Amaral Gurgel Kiss

Universidade do Vale do Paraíba - UNIVAP

São José dos Campos, SP

*Palavras-chave:* MM-2, benzofenona-d<sub>10</sub>, constantes de força da benzofenona-d<sub>10</sub>.

Em comunicação ao XVIII ENFMC, apresentamos a síntese da benzofenona deuterada, a obtenção da forma metaestável e os espectros no infravermelho das formas estável e metaestável da molécula no estado sólido, com vistas a estabelecer relações dependentes do dimorfismo, através dos espectros vibracionais. A presente comunicação envolve o modelamento da molécula isolada, com o emprego do método computacional MM-2. Este método envolve os programas BEL, GEL, FEL e NCA, que permitem calcular as frequências fundamentais da molécula, quando se define o campo de força e são fornecidas algumas constantes de força de partida. Como em trabalhos anteriores, o campo de força utilizado foi o de valência e as constantes de força iniciais foram obtidas de estudos feitos com benzenos monosubstituídos, em configurações do tipo Ph<sub>2</sub>-X. O modelo foi montado a partir das coordenadas cartesianas, previamente calculadas com base em resultados de Raios-X da molécula no estado sólido. Seguiu-se a introdução de coordenadas internas e de simetria e a imposição do campo de força selecionado. Como é usual, o método usado para o cálculo das frequências foi o da matriz GF de Wilson. Foram usadas as frequências experimentais dos espectros no infravermelho na região de 4000 - 400 cm<sup>-1</sup>, para o ajuste das constantes de força. Com base nos resultados obtidos foi feita a atribuição de frequências para a benzofenona e benzofenona-d<sub>10</sub>. Estes resultados, quando comparados com aqueles obtidos para as formas metaestáveis dessas moléculas, permitem obter algumas conclusões sobre o polimorfismo dessas espécies.

## RESPOSTA ÓPTICA NÃO-LINEAR DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS.

*Nestor Saavedra, Sylvio Camuto*

Departamento de Física de Materiais e Mecânica do Instituto de Física da USP.

*Palavras-chave:* hiperpolarizabilidade, p-nitroanilina, sistemas *push-pull*.

Com o advento do laser e da tecnologia fotônica, o interesse por compostos que ofereçam uma resposta não-linear a campos eletromagnéticos externos vem crescendo nos últimos anos. Atualmente, os compostos orgânicos vem sendo estudados mais intensamente que os inorgânicos, que foram os primeiros a receber uma aplicação prática, devido a facilidade de síntese e apresentarem desde já respostas não lineares bem mais promissoras que os inorgânicos. O nosso interesse concentrou-se nos chamados sistemas *push-pull* que são constituídos de anéis aromáticos com dois radicais, um doador e outro receptor de cargas. A interação destes dois radicais com a nuvem de elétrons  $\pi$  localizada no anel aromático dá origem a uma grande polarização de cargas que influi diretamente no alto valor observado da primeira hiperpolarizabilidade,  $\beta$ , importante por ser a responsável pela geração do segundo harmônico (SHG). Nestes sistemas, um bom exemplo de composto é a Paranitroanilina, que é utilizado como um referencial para qualquer outra molécula que se deseje estudar, devido as suas propriedades ópticas bem sensíveis e conhecidas. O nosso sistema constitui-se de um átomo de fluor e outro de lítio substituindo os dois radicais da p-nitroanilina, o que combina um radical muito eletronegativo (fluor) com outro muito eletropositivo (lítio), o que condiciona uma alta polarização das cargas no anel aromático. O nosso tratamento consistiu em inicialmente otimizar a geometria através de um cálculo *ab initio* com uma base STO-3G. Após isso, utilizamos um cálculo de Teoria de Perturbação de Muitos Corpos (MBPT) até quarta ordem usando a base 6-31G. Todos os cálculos de otimização de geometria e das correções de energia foram obtidos no mesmo nível de cálculo para os dois sistemas com o programa GAUSSIAN 92. Assim, de posse dos valores da energia em função do campo elétrico externo podemos obter os valores da polarizabilidade,  $\alpha$ , e da primeira hiperpolarizabilidade,  $\beta$ . Os nossos resultados apontaram para um valor das polarizabilidades cerca de uma ordem de grandeza maior do que aqueles que se obtém para a paranitroanilina, o que condiciona um comportamento óptico não-linear bastante promissor. (CNPq, FAPESP)

## APLICAÇÃO DO ESPAÇO LOCAL PARA O ESPALHAMENTO ÍON-SUPERFÍCIE: CÁLCULO MODELO PARA O SISTEMA $H^+ - W$

*Claudia Regina Campos de Carvalho, Celso P. de Melo*

Departamento de Física-UFPE

*Bernard Kirtman*

Department of Chemistry University of California, Santa Barbara

*Palavras-Chave:* espalhamento íon-superfície, matriz densidade, aproximação do espaço local

Recentemente o método da Aproximação do Espaço Local (AEL) foi estendido para o tratamento de interações eletrônicas dependentes do tempo. Neste trabalho serão inicialmente apresentadas as equações básicas de um novo formalismo baseado na AEL para o problema do espalhamento íon-superfície. A aplicação desse tratamento para um sistema modelo constituído por um íon  $H^+$  e um aglomerado de átomos de tungstênio será também mostrada. Em particular, serão apresentados resultados para a transferência de elétrons a partir do substrato durante o processo de espalhamento, e sua variação com a adoção de diferentes energias iniciais para o íon incidente. No tratamento desenvolvido a evolução do espalhamento é dividida em uma longa sequência de intervalos finitos de tempo, de modo que em cada um deles a correção correspondente para a matriz densidade global do sistema possa ser calculada em duas etapas distintas. Dentro do espírito da AEL, na primeira, que é comandada pelo hamiltoniano com coordenadas nucleares fixas no instante inicial do intervalo de tempo considerado, apenas a contribuição associada à projeção do hamiltoniano na região local de interação (definida como aquela contendo o projétil juntamente com os átomos do alvo mais próximos ao ponto de impacto) é incluída. As demais projeções do hamiltoniano total mais as correções devidas à mudança de coordenadas ocorrida durante o intervalo são levadas em conta na segunda etapa, que envolve a linearização da equação de movimento para a matriz densidade global. A correta transferência de carga para o problema é assegurada durante todo o processo pela imposição da condição de idempotência para a matriz densidade global a cada instante. A extensão do tratamento para diferentes situações de espalhamento por superfícies extensas será também discutida.

(Apoio CNPq, FINEP, FACEPE).

## MÉTODO DE PARTIÇÃO MODIFICADO APLICADO AO ESTUDO DE BH, LiH E Li<sub>2</sub>

*José Francisco da R. Neto & José David M. Vianna*

Departamento de Física - Universidade de Brasília  
70910 - 900 Brasília - DF

*Palavras-Chave:* método de partição modificado, energia de correlação, cálculo (CI)

Neste trabalho apresenta-se um método matemático para determinar a energia de correlação em moléculas. Esse método, denominado Método de Partição Modificado (MPM), baseia-se na técnica de partição, originalmente proposta por Löwdin [1] e modificada por Logrado e Vianna [2]. São apresentadas as equações básicas do (MPM) para o estudo de estrutura eletrônica de moléculas com o uso do Hamiltoniano de Möller-Plesset. Usa-se como base (MPM) o determinante Hartree-Fock e suas excitações. Aplicam-se essas equações do (MPM) ao estudo de LiH, BH e Li<sub>2</sub> e compara-se o seu resultado com cálculos (CI), usando a mesma base atômica. Os resultados obtidos com o (MPM), para a energia de correlação coincidem com os do (CI) com vantagens sobre o processo usual de diagonalização (PUD); por exemplo: enquanto o (PUD) envolve o problema secular completo relativo ao Hamiltoniano do problema, o (MPM) permite determinar cada autovalor  $E_i$  e correspondente autovetor  $\Psi_i$  de interesse, de forma independente, o que implica numa redução de tempo computacional. Comparado com a teoria de perturbação de muitos corpos (MBPT), o (MPM) apresenta a característica de não usar, para o cálculo de  $E_i$ , expansão em potências do potencial  $V$ ; isto torna suas equações aplicáveis, em princípio, a  $V$  grande ou pequeno, o que não ocorre numa teoria de perturbação. [1] P. O. Löwdin, *J. Math. Phys.* **3**, 969(1962); [2] P. G. Logrado e J. D. M. Vianna, *J. Phys. Chem.* (1996) - a aparecer.

(CAPES)

## CONSTANTE DIELÉTRICA PARA *CLUSTERS* DE NEÔNIO

*Marcello F. Costa e Marcos A. Castro*

Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás

*Palavras-Chave:* propriedades elétricas, polarizabilidades, constante dielétrica

Quando a polarizabilidade dos átomos que constituem um sólido dielétrico é conhecida, a constante dielétrica do sólido pode ser calculada aproximadamente pela equação de Clausius-Mossotti. O inconveniente desta abordagem está no fato de que os átomos que constituem o sólido são tratados como se fossem esféricos e independentes uns dos outros, quando na verdade eles têm sua distribuição de cargas completamente distorcida quando se ligam para formar o cristal. Nesse trabalho é proposta é uma abordagem diferente onde o sólido é representado por *clusters* de átomos e a constante dielétrica obtida em termos da polarizabilidade destes *clusters*. Inicialmente o método de Hartree-Fock foi utilizado para calcular a polarizabilidade de uma cadeia linear de átomos de Ne. Os valores da constante dielétrica calculada para um campo elétrico aplicado, paralelo ao eixo de simetria, foram 1.249, 1.255, 1.257, 1.259 e 1.260, respectivamente para *clusters* com 1,2,3,4 e 5 átomos. Para um campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo de simetria, os valores obtidos foram 1.249, 1.246, 1.244, 1.244 e 1.243. Estes resultados mostram que a constante dielétrica de um sólido pode ser obtida de forma bastante precisa a partir de *clusters* com poucos átomos.

(CAPES, CNPq)

## ESTUDO TEÓRICO DE EFEITOS DE SOLVENTE NO ESPECTRO DE ABSORÇÃO DO BENZENO.

*S.M. Urahata, K. Coutinho e S. Camuto.*  
Departamento de Física de Materiais e Mecânica  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

**Palavras-chave:** benzeno, espectroscopia, solvente

O estudo teórico de espectroscopia molecular na região do visível e ultravioleta tem sido amplamente realizado em fase gasosa. É sabido que os espectros tanto de absorção como de emissão diferem em característica quando comparados em fase gasosa e em solução. Considerando que todos os processos bioquímicos ocorrem em solução tem-se um importante exemplo da necessidade de se compreender certos processos moleculares em fase líquida. Em nossos estudos de solvatocronismo, utilizamos métodos quânticos para estudar espectros moleculares de duas maneiras. De um lado, utilizamos o campo de reação autoconsistente SCRF (self-consistent reaction field), onde o solvente é descrito como um meio contínuo polarizável caracterizado por uma constante dielétrica  $\epsilon$ . O procedimento é similar ao de fase gasosa, gerando-se configurações eletrônicas excitadas através de um cálculo de interação de configurações (CI). Por outro lado, utilizamos um procedimento supermolecular onde o sistema é formado pela molécula de soluto envolvida por moléculas do solvente cujas estruturas são geradas por simulação de Monte Carlo. Apresentamos resultados de cálculos tipo *ab initio* e semi-empíricos nas supermoléculas considerando um variado número de primeiros vizinhos. Obtemos um 'red shift' do espectro de absorção para o benzeno em água e ciclohexano de acordo com os resultados experimentais. Comparações com os resultados obtidos pelo campo de reação SCRF são mostrados. Finalmente, analisamos a presença de possíveis efeitos hidrofóbicos na interação desses sistemas.

(FAPESP, CNPq)

## EFEITOS NÃO-MARKOVIANOS NO ESPECTRO DE RESSONÂNCIA FLUORESCENTE E DE ABSORÇÃO DE UM ÁTOMO DE 2-NÍVEIS EM CAMPO BICROMÁTICO

*G. A. Prata e S. S. Mizrahi*  
Universidade Federal de São Carlos - Dep. de Física - S. Carlos - SP

**Palavras-chave:** não-Markoviano, ressonância fluorescente, campo bicromático

Um dos esquemas usados no estudo de processos quânticos irreversíveis faz uso de uma equação mestra, que é a equação de Liouville contendo termos adicionais que vem do acoplamento do sistema de interesse (S) com um Reservatório (sistema com muitos graus de liberdade) e que respondem pela irreversibilidade do sistema S. Neste esquema o mais familiar tratamento encontrado na literatura faz uso da aproximação de Markov, que assume que o tempo de correlação  $\tau$  das variáveis do Reservatório é muito menor que o tempo característico de relaxação  $\gamma$  do Sistema. Entretanto, experimentos têm mostrado que em muitos processos as escalas de tempo  $\tau$  e  $\gamma$  são da mesma ordem. Desse modo é importante fazer um estudo teórico de processos físicos levando-se em conta efeitos não-Markovianos. Neste trabalho nós examinamos as modificações nas propriedades radiativas de um átomo de 2-níveis, bombeado por um campo bicromático, utilizando-se uma descrição não-Markoviana. Os efeitos não-Markovianos são introduzidos por meio de uma distribuição não constante de frequências para o reservatório, constituído por um grande número de osciladores harmônicos. O espectro de absorção é obtido para o caso em que um dos campos é muito fraco em relação ao outro. O espectro de ressonância fluorescente, caracterizado pela distribuição espectral do campo espalhado pelo átomo, é calculado usando-se o teorema quântico da regressão. Os efeitos não-Markovianos produzem alterações que se tornam mais evidentes a altas temperaturas, onde observa-se um desdobramento do pico central de ambos os espectros.

(CNPq)

## CÁLCULO DO TENSOR DE ALINHAMENTO PARA A FOTOIONIZAÇÃO DO ÁTOMO DE HÉLIO

*Cláudia Pio Ferreira*

*Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos*

Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* Alinhamento, Fotoionização do Hélio, Coordenadas Hiperesféricas.

Este projeto tem por objetivo a análise da correlação eletrônica no átomo de Hélio através do tensor de alinhamento. O processo físico básico pode ser descrito pela reação:  $\nu + \text{He}^0 \rightarrow \text{He}^{*}(n) \rightarrow \text{He}^+(n=1) + \nu'$ . Na primeira etapa a radiação incide sobre o átomo de Hélio provocando a fotoionização de um dos elétrons e a formação de um íon excitado. Na segunda etapa o íon hidrogenóide decai para o estado fundamental emitindo fótons. A diferença das intensidades de fótons polarizados é observada medindo-se as intensidades parciais em direções perpendiculares. Estudamos a teoria geral desenvolvida por U. Fano e Macek no artigo "*Excitation and Polarization of the Emitted Light*", onde a análise desenvolvida focaliza o tensor de alinhamento cujas componentes são proporcionais aos valores médios quadráticos em  $J_z$ ,  $J_y$  e  $J_x$  como, por exemplo,  $\langle J_x^2 - J_y^2 \rangle$ . Isto envolve a reobtenção das fórmulas e portanto o entendimento da álgebra dos momentos angulares pertinentes ao problema. A seguir, especificamos esta teoria geral desenvolvida independentemente de escolha de coordenadas, ao método adiabático hiperesférico. Isto significa concretizar as fórmulas e resultados às particularidades do método adiabático. Na medida em que o método adiabático contempla aproximações sucessivas, que se inicia com a aproximação adiabática extrema até correções não adiabáticas paulatinas, todas as quantidades físicas (em particular o alinhamento) obedecem a hierarquia. Portanto, analisamos a sensibilidade do tensor de alinhamento a cada uma das correções. Programas de manipulação algébrica utilizando a linguagem do Maple V foram utilizados a fim de obtermos os resultados apresentados no artigo de U. Fano e Macek.

(FAPESP)

## Dynamical Phase Diagram of the Two-dimensional Three-state Chiral Potts Model

*José A. Redinz \* and Francisco A. Tamarit \*\**

\* Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG

\*\* FAMAFA, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina

*Palavras-chave* : chiral Potts model, phase transitions, damage spreading

Since the first observations of modulated structures in ferroelectric and magnetic materials, great interest has arisen in the study, both experimentally and theoretically, of systems which might exhibit such modulations. From the theoretical point of view, two models are basically studied: the Axial Next-Nearest-Neighbor Ising (ANNNI) model and the Chiral Potts (or Clock) model. The Hamiltonian of both models contain competing interactions which give rise to spatially modulated structures. In the chiral Potts model the competition is provided by chiral, or helical, interactions along a given lattice axis. This model can serve as a prototype for the melting of a commensurate adsorbed phase. Its experimental realization in two dimensions is provided by dissociated Hydrogen on Fe(110). We have performed a Monte Carlo study of the dynamical phase diagram of the two-dimensional three-state chiral Potts model by comparing the time evolution of two initially different configurations subjected to the same thermal noise - the Spread of Damage method. We show that the  $T$  (the temperature)  $\times \Delta$  (the chiral field) phase diagram is different of the thermodynamical phase diagram which has been studied by different approximate methods. In particular, we show that, for any value of  $\Delta$ , there is a low-temperature phase in which the final Hamming distance depends on the initial damage. At intermediate temperatures, there is a phase in which the final Hamming distance is independent of the initial damage, and, at high-temperatures, there is a phase in which this distance goes to zero for every initial damage. We show that the transition frontiers between these phases do not coincide with those of the thermodynamical phase diagram which separate the paramagnetic, the ferromagnetic, the chiral, and, the incommensurate phases. We also study, by this same technique, the dynamical critical exponents of this model.

## MODELO ANNNI NA PRESENÇA DE UM CAMPO ALEATÓRIO

*Mário N. Tamashiro e Silvio R. A. Salinas*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo

*Palavras-Chave*: sistemas modulados, campo aleatório, diagrama de fases

O modelo ANNNI (*Axial-Next-Nearest-Neighbor-Ising*) é um dos sistemas mais simples que apresenta estruturas espacialmente moduladas, consistindo num modelo de Ising numa rede cúbica com interações ferromagnéticas intraplanares,  $J_0 > 0$ , interações ferromagnéticas interplanares de camadas sucessivas,  $J_1 > 0$ , e interações antiferromagnéticas interplanares de camadas segundas vizinhas,  $J_2 < 0$ . Uma questão importante acerca destes modelos é a persistência das fases moduladas com a introdução de elementos de desordem (ligações aleatórias, diluição de sítios ou ligações, campos aleatórios, etc.). Neste trabalho consideramos uma versão de campo médio do modelo ANNNI em uma rede de Bravais, na presença de um campo aleatório definido por uma distribuição de probabilidades independentes do tipo delta bimodal simétrica. Obtivemos os diagramas de fases em termos da temperatura reduzida  $k_B T/J$  e do parâmetro de competição  $p = -J_2/J > 0$ , com  $J = J_0 = J_1$ , para vários valores da intensidade  $H$  do campo aleatório. Embora a linha de transições para a fase paramagnética na ausência de campo aleatório seja sempre de segunda ordem, para campos aleatórios de moderada intensidade verificamos a ocorrência de uma linha de pontos tricríticos separando uma superfície crítica a altas temperaturas de uma superfície de transições de primeira ordem a baixas temperaturas. Observamos também transições entre fases moduladas de mesmo comprimento de onda, porém com estruturas espaciais distintas. O diagrama de fases não sofre alterações qualitativas drásticas para campos aleatórios de baixa intensidade. O efeito de campos moderados consiste na mudança da ordem das transições para a fase desordenada. Para campos aleatórios intensos, as fases moduladas são substituídas pela fase paramagnética.

(FAPESP, CNPq)

## DIAGRAMA DE FASE DO MODELO DE ISING SEMI-INFINITO EM CAMPOS ALEATÓRIOS

*Alberto S. de Arruda*

Departamento de Matemática-UFMT-ICLMA

*Wagner Figueiredo*

Departamento de Física-UFSC

*Palavras-Chaves:* tricrítico, campo aleatório, trimodal

O problema do modelo de Ising em campo aleatório tem recentemente passado por intensas investigações teóricas e experimentais. Dentre as questões que tem sido investigadas se destacam a dimensionalidade crítica e o diagrama de fase. Há um consenso quanto à dimensionalidade crítica mínima, que está muito bem estabelecida,  $d_c = 2$ . Por outro lado, são observados diferentes diagramas de fase para diferentes funções de distribuições dos campos aleatórios. Para a distribuição Gaussiana, o diagrama de fase só apresenta linhas de segunda ordem. Já a distribuição bimodal, seu diagrama de fase exibe um ponto tricrítico. Finalmente, com a distribuição trimodal, o diagrama de fase apresenta uma linha de pontos tricríticos. Nesta área, o magnetismo de superfície surge como um novo campo de grande interesse. A principal questão é conhecer os valores do parâmetro de troca dos spins da superfície, para os quais temos uma superfície magnética sobre um volume paramagnético. A existência da superfície ordenada é experimentalmente conhecida. Portanto, neste trabalho, estudamos o diagrama de fase de um modelo de Ising em uma rede cúbica simples semi-infinita, com um campo aleatório distribuído restritamente na superfície, através da distribuição trimodal. Para estudar a transição ferro-paramagnética na superfície utilizamos da técnica do Grupo de Renormalização de Campo Médio. Comparamos dois blocos de tamanhos diferente, com  $N' = 2$  e  $N = 4$  spins (ambos com spin na superfície e no volume). Mostramos que o diagrama de fase no plano  $(t, h)$ , para diferentes valores de  $\Delta = J_s / J_B - 1$ , apresenta uma linha finita de pontos tricríticos correspondendo aos valores da diluição dos campos aleatórios ( $p$ ) entre '0 e 0.08'. A temperatura e a magnitude do campo aleatório dos pontos tricríticos crescem com o crescimento do parâmetro  $\Delta$ . Os nossos resultados mostram que o comportamento tricrítico é perdido com a diluição do campo aleatório a partir de  $p=0.08$ .

## FORMALISMO HAMILTONIANO E O MODELO GENERALIZADO DOS CRISTAIS LÍQUIDOS FERROELÉTRICOS ESMÉTICOS.

Cláudio de C. Aguiar; Dionícarlos Soares de Vasconcelos e Aurino Ribeiro Filho  
Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

*Palavras-Chave:* cristal líquido, ferroelétrico, hamiltoniano

A partir da expressão do potencial termodinâmico de energia livre introduzido por Zeks, Huang, Viner, Carlsson e Dahl, estudamos o problema de transições de fase (cálculo de temperaturas críticas, equações do ângulo de Tilt, de polarização, "pitch" e as fases Sm A(normal), Sm C\* (incomensurável) e Sm (comensurável), obtendo resultados que estendem aqueles obtidos recentemente, por K.C. Mundim, P. Pitanga e A. Ribeiro Filho (1993-1995). Utilizando o formalismo hamiltoniano (canônico) ao modelo generalizado de Landau, ou seja, a partir da analogia entre o espaço de fase de um corpo num sistema 2D e o espaço das coordenadas do parâmetro de ordem (diretor  $n$ ) do cristal líquido DOBAMBC [ $p$ -( $n$ -decyloxybenzylidene)- $p$ -amino-(2-methyl-butyl)cinnamate]. Observou-se as vantagens do formalismo empregado obtendo-se expressões novas e/ou generalizadas para as equações do movimento, temperaturas críticas, bem como na análise de estabilidade através da obtenção da matriz simplética do citado sistema. O formalismo canônico através dos métodos da Mecânica neo-qualitativa de Poincaré facilita e explicita a obtenção dos resultados do problema de transição de fase em sistemas tipicamente incomensuráveis como o mencionado cristal líquido esmétrico. (UFBA, CNPq).

## THE SPREADING OF DAMAGE IN FERROMAGNETIC THIN FILMS: PROFILES AND TEMPORAL EVOLUTION

*Ayrton V. Lima, Marcelo L. Lyra and Uriel M. S. Costa*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

*Key Words:* Spreading of Damage, Ising Thin Films, Critical Behavior

The spreading of damage technique has been widely used in order to study the critical behavior of Ising-like systems. The technique is based on the synchronous Monte-Carlo update of two lattices with distinct spin configurations. The Hamming distance, defined as the fraction of spins which are distinct in the two configurations, displays a critical behavior at the so called critical spreading temperature.

In this work we study the spreading of damage in  $S = 1/2$  Ising ferromagnetic thin films with an enhanced surface coupling constant. In our simulations we start with two configurations which differ for just one spin. We obtain that, near the bulk critical spreading temperature, the Hamming distance profile changes its shape from a positive curvature profile for  $J_S/J < 1.3$  to a negative curvature profile for  $J_S/J > 1.4$ , exhibiting a crossover with quite flat profiles for  $1.3 < J_S/J < 1.4$ . Also, we investigate the dependence of the average Hamming distance as a function of the film thickness and revealed that it displays a monotonic behavior with similar trends. We observe a memory effect for  $J_S/J > 1$  reflected by the fact that the profile exhibits a pronounced kink at the layer where the damage is initially introduced, and we relate this fact with the critical slowing down phenomena which takes place near criticality. Furthermore, the temporal evolution of the damage front is followed and it shows quite distinct regimes near and above the bulk critical spreading temperature.

## PROPAGAÇÃO DE DANOS EM UM FILME ISING COM CAMPO ALEATÓRIO NA SUPERFÍCIE

*Heber Ribeiro da Cruz e Uriel Medeiros de Souza Costa*

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas. `heber@fis.ufal.br`

*Palavras Chave:* Modelo de Ising, Filmes, Propagação de Danos

O estudo da transição de fase em sistemas magnéticos finitos tem, recentemente, despertado considerável interesse. Uma das razões para este interesse é o efeito da espessura do filme nos resultados. Neste trabalho estudamos um filme, isto é, um sistema "infinito" em duas dimensões e finito na terceira, tipo Ising com campo aleatório nas superfícies livres. Usamos o método da propagação de danos, com a dinâmica de Glauber. Este método permite distinguir uma fase congelada, onde o dano não se propaga, de uma fase caótica, onde o dano se propaga. Obtivemos a distância de Hamming para diversas espessuras do filme, diversos valores do campo e temperaturas. A dependência com a temperatura obtida é aquela esperada para a dinâmica de Glauber: fase congelada nas baixas temperaturas e fase caóticas nas altas temperaturas. Observamos que a medida que o campo magnético cresce, a temperatura de transição e a distância de Hamming na fase caótica decrescem. Esta diminuição, entretanto, não é contínua, mas ocorre aos saltos. Assim, curvas correspondentes a diferentes intervalos de valores de campo apresentam o mesmo comportamento, isto é, praticamente colapsam. O grupo de curvas correspondentes ao intervalo de campos mais fracos tem um valor da distância de Hamming, para altas temperaturas, é igual  $1/2$  e os grupos correspondentes a campos cada vez mais fortes apresentam valores cada vez menores. A medida que aumentamos a espessura do filme a diferença entre os grupos tende a diminuir. Para estes filmes (espessos) obtivemos, como esperado, o mesmo resultado do sistema tri-dimensional na ausência do campo magnético. Vemos então que este modelo apresenta um comportamento rico e interessante e que reproduz, para valores limites, resultados conhecidos.

(CNPq)

## VIDRO DE SPIN DE ISING NA REDE DE BETHE

Alexandre Rosas e Sérgio Coutinho  
Departamento de Física – UFPE

*Palavras-Chave:* vidros de spin, rede de bethe, multifractalidade

Estudamos o modelo de vidro de spin de Ising na rede de Bethe, de coordenação arbitrária, com as constantes de acoplamento obedecendo a distribuições de probabilidade gaussiana, bimodal e uniforme. Investigamos a estrutura do parâmetro de ordem local de Edwards-Anderson (EA) destacando as propriedades fractais e multifractais da fase vidro de spin. A partir de uma relação de recorrência exata para a magnetização local na rede de Bethe, fizemos simulações numéricas do parâmetro de ordem local de EA. Em particular, analisamos o caso com condições de contorno livres (aleatórias), para uma rede de coordenação 4 com  $10^6$  gerações utilizando  $10^3$  amostras. Usamos a abordagem descrita na referência [1] para estudar as propriedades multifractais do perfil deste parâmetro de ordem ao longo de um ramo da rede de Bethe. Realizamos o cálculo da função  $f(\alpha)$ , que descreve como as singularidades da medida estão distribuídas e verificamos que este espectro independe da forma da distribuição de probabilidade considerada. Observamos que na fase vidro de spin os valores mínimo e máximo de  $\alpha$  convergem para um mesmo valor indicando não haver estrutura multifractal (espectro trivial), enquanto próximo da temperatura de transição o espectro é não trivial. As propriedades multifractais do perfil de uma única amostra foram, também, estudadas, exibindo um largo espectro de expoentes  $\alpha$  quando comparado ao correspondente para muitas amostras. Finalmente, calculamos o expoente crítico  $\beta$  do parâmetro de ordem de EA obtendo valores aproximadamente iguais para as três distribuições consideradas ( $\beta=0.91\pm 0.03$  para a distribuição bimodal,  $\beta=0.90\pm 0.04$  para gaussiana e  $\beta=0.91\pm 0.06$  para uniforme).

[1] S. Coutinho, J.R.L. de Almeida, e E.M.F. Curado, *Fractals in Natural and Applied Sciences*, M.M. Novak, ed. North Holland, 81(1994). S. Coutinho, O. Donato-Neto, J.R.L. de Almeida, E.M.F. Curado e W.A.M. Morgado, *Physica A*, 185, 271(1992).

## SQUARE-LATTICE FRUSTRATED HEISENBERG ANTIFERROMAGNET OF SPIN 1/2 IN A STRONG MAGNETIC FIELD

S. Ghuzman

*International Center of Condensed Matter Physics -UnB.*

*Keywords:* Heisenberg antiferromagnet.

We applied the specific “bosonization” approach to the frustrated Heisenberg Antiferromagnet of spin 1/2 in a strong magnetic field. Close to the saturation field, where the number of spin flips remains small, it is possible to write down the effective Bose Hamiltonian for the quantum particles (flippons) explicitly.

We found in the frustrated case that the two particles with wave vectors close to  $(\pi, \pi)$  attract each other and in the interval of fields  $h_0 < h < h_{01}$  a condensate of the flippon pairs is formed, leading to a magnetic phase with a short range order in the ground state and with a gap in the elementary excitation spectrum. The symmetry of axes  $x$  and  $y$  in the gapped phase is spontaneously broken. The magnetization vs magnetic field becomes flat in this interval of fields.

In the interval of fields  $h_{01} < h < h_{02}$  a single-particle Bose condensate is formed, leading to a quasi-one-dimensional magnetic phase with long-range order (LRO) in the ground state and a gapless mode. This phase corresponds to an assembly of chains with fixed longitudinal magnetization and with the transverse magnetization changing along the chain antiferromagnetically. At non-zero temperatures the LRO in the transverse correlations is destroyed and transforms to a quasi-LRO with power-law spin-spin correlations with nonuniversal exponents. In this region of fields magnetization depends on field linearly with a logarithmic corrections.

## EXPOENTES CRÍTICOS DO MODELO DE ISING COM COMPETIÇÃO ENTRE AS DINÂMICAS DE GLAUBER E KAWASAKI

*Bartira C. S. Grandi e Wagner Figueiredo*

Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis - SC

*Palavras-Chave:* expoentes críticos, modelo de Ising, simulações de Monte Carlo

O modelo de Ising bidimensional ferromagnético com competição entre as dinâmicas de Glauber e Kawasaki é estudado através de simulações de Monte Carlo. O contato do sistema com o banho térmico à temperatura  $T$  é simulado pelo processo estocástico de Glauber onde apenas inversões de um spin de cada vez são permitidas. Nosso sistema está submetido a um fluxo externo de energia que é simulado pelo processo de Kawasaki, o qual mantém o parâmetro de ordem constante, através da troca entre spins vizinhos mais próximos. Este modelo exhibe o fenômeno de auto-organização quando a dinâmica de Kawasaki é a dominante e uma teoria de campo efetivo é considerada. Neste trabalho estudamos, através de simulações de Monte Carlo e relações de escala para sistemas de tamanho finito, em redes quadradas com  $L$  variando entre 6 e 80, sendo  $L$  a dimensão linear do sistema, as transições de fases entre os estados estacionários do sistema. Particularmente, consideramos as transições das fases ferro e antiferromagnética para a fase paramagnética em função do parâmetro de competição entre as duas dinâmicas estocásticas. Calculamos diversos expoentes críticos nas transições: o expoente crítico associado ao comprimento de correlação, o expoente crítico da magnetização e o expoente associado à susceptibilidade magnética. Esses expoentes críticos foram determinados para diversos valores do parâmetro de competição entre as dinâmicas de Glauber e Kawasaki. Mostramos que os valores obtidos para esses expoentes estão de acordo com os correspondentes de equilíbrio. Estes resultados corroboram a idéia de que modelos de Ising com spin  $s = 1/2$ , no equilíbrio e fora do equilíbrio, pertencem à mesma classe de universalidade.

(CNPq e FINEP)

## DESIGUALDADE DE CORRELAÇÃO PARA MODELOS DE POTTS ANTIFERROMAGNÉTICOS EM UM GRÁFICO BIPARTIDO

*Sabino Ferreira e Alan Sokal\**

Universidade Federal de Minas Gerais - Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Física

*Palavras-Chave:* Modelo de Potts, Desigualdade de Correlação, Susceptibilidade Staggered

O modelo de Potts com  $q$ -estados é definido pelo Hamiltoniano reduzido:  $H = -J \sum \delta_{\sigma_x, \sigma_y}$ , onde a soma inclui todos os pares de sítios vizinhos próximos de uma rede finita  $\Lambda \subset Z^d$ . Cada spin  $\sigma_x$  toma como valor um dos inteiros em  $\{1, 2, \dots, q\}$ . Consideramos o caso *antiferromagnético* onde  $J = -\beta < 0$ . Seja  $G = (\Lambda, E)$  um gráfico finito não-direcionado, onde  $\Lambda$  é o conjunto de sítios e  $E$  o de ligações.  $G$  é considerado *bipartido* quando  $\Lambda$  puder ser particionado como  $\Lambda = A \cup B$ , de tal forma que qualquer ligação de  $E$  tem uma extremidade em  $A$  e a outra em  $B$ . Neste caso, usando a representação tetraédrica onde representamos os  $q$  possíveis valores do spin  $\sigma_x$  por vetores unitários dispostos simetricamente em um tetraedro em  $\mathcal{R}^{q-1}$ , a função correlação de dois pontos será:  $G(x, y) \equiv \langle \sigma_x \cdot \sigma_y \rangle = \left( (q \delta_{\sigma_x, \sigma_y} - 1) / (q - 1) \right)$ . Neste caso mostramos que  $G(x, y) \geq 0$  se  $x$  e  $y$  estão em  $A$  (ou em  $B$ ) e  $G(x, y) \leq 0$  se  $x$  está em  $A$  e  $y$  em  $B$ . Isto nos permite mostrar que a susceptibilidade *staggered*  $\chi_{stagger} \equiv \tilde{G}((\pi, \pi))$ , sendo que  $\tilde{G}(p) = \sum e^{ip \cdot x} G(x)$  é tal que  $|\tilde{G}(p)| \leq \tilde{G}((\pi, \pi))$ . Em trabalho recente (PRB 51 (1995) 6727) usamos este resultado para mostrar que, no caso de  $q = 3$  em  $d = 2$  a susceptibilidade *staggered* é uma grandeza crítica, comportando em função de  $\beta$  como  $\chi_{stagger} \approx \xi^{5/3}$ , sendo  $\xi$  o comprimento de correlação e onde:  $\xi(\beta) = A e^{2\beta} \beta [1 + a_1 e^{-\beta} + a_2 e^{-2\beta} + \dots]$ .

\* Endereço permanente: New York University - Department of Physics.

## RANDOM ONE-DIMENSIONAL LATTICE GAS

A. P. Vieira and L. L. Gonçalves  
Departamento de Física - UFCE

*Palavras-Chave:* Lattice gas, Ising model, random systems

The one-dimensional lattice gas [1], closed chain ( $N$  sites), with random short- and long-range interactions is considered. The problem is studied in the framework of the bond problem, and the random variables are considered to satisfy bimodal annealed distributions which are adjusted by introducing pseudo-chemical potentials. The distribution of the short-range interactions  $\varepsilon_{j,j+1}$  is explicitly given by

$$\wp(\varepsilon_{j,j+1}) = p\delta(\varepsilon_{j,j+1} - \varepsilon_{11}) + (1-p)\delta(\varepsilon_{j,j+1} - \varepsilon_{12}),$$

and the long-range interactions are considered to satisfy a strongly correlated distribution [2]. The model is exactly solved by mapping it onto the random Ising model and its solution is obtained by performing a decimation and using the functional integral method. We have already considered the particular case of uniform long-range and dilute short-range interactions [3], and determined that such system can present two phase transitions and different critical temperatures. In the present work we examine two more cases, namely (a) competing short-range and uniform long-range interactions and (b) random long-range and uniform short-range interactions. For the first case the system seems to be able to present three phase transitions with different critical temperatures, while for the second case the system can exhibit two phase transitions and only one critical temperature. For both cases the phase diagram is obtained for various sets of parameters and the results are compared to the ones obtained for the non-random model [4] and the classical gas [5].

[1] T. D. Lee and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **87**, 410 (1952).

[2] T. Horiguchi and L. L. Gonçalves, *Mod. Phys. Lett.* **B2**, 1137 (1988).

[3] A. P. Vieira and L. L. Gonçalves, *STATPHYS* **19** (1995).

[4] A. P. Vieira and L. L. Gonçalves, *Condensed Matter Physics (Ukraine)* **5**, 210 (1995).

[5] S. Kurioka and K. Ikeda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 3277 (1988).

## CHAOTIC LATTICE- GAS MODEL AND ITS STABILITY

V.I. Yukalov and E.P. Yukalova

Centro Internacional de Física da Materia Condensada, UnB

**Keywords:** lattice gas, chaotic diffusion, stability properties

A nonuniform system is considered consisting of two phases with different densities of particles. At each given time the distribution of the phases in space is chaotic: each phase filling a set of regions with different shapes and locations. A chaotic diffusion process intermixes these regions by varying their shapes and locations in a random way. To investigate the statistical properties of such a system, it is exemplified by a lattice-gas model.

The detailed analysis of thermodynamics of the model is given with the help of numerical calculations. The following characteristics are analysed as functions of temperature: average densities of the more dense and of the diluted phases, their concentrations, the chemical potential, pressure, specific heat, and the isothermal compressibility.

Special attention is paid to the investigation of stability conditions. In addition to the usual thermodynamic stability conditions, such as the positiveness of the specific heat and of isothermal compressibility, the condition of heterophase stability is studied. It is shown that when the latter condition is fulfilled the system may be locally unstable, displaying chaotic motion, but at the same time it is globally stable. This coexistence of local instability and of global stability is a manifestation of the phenomenon called self-organized heterophase chaos. Thermodynamics of unstable states is also studied. It is shown that thermodynamic and heterophase instabilities are related with each other.

## DINÂMICA DE KAWASAKI, DISTRIBUIÇÕES NO EQUILÍBRIO E SEPARAÇÃO DE FASE EM SIMULAÇÕES

Cláudio Saburo Shida & Vera Bohomoletz Henriques  
Dpto de Física Geral, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** Monte Carlo, Kawasaki, Ising.

Simulações computacionais em modelos de rede para soluções simples e/ou complexas, microemulsões ou moléculas anfífilas (cristais líquidos) são realizados, frequentemente, no ensemble canônico (dinâmica de Kawasaki) utilizando o método de Monte Carlo. Nestas simulações procura-se estudar as propriedades do sistema no equilíbrio termodinâmico, principalmente na região de separação de fase. A aplicação inadequada da prescrição de Kawasaki nestes tipos de simulações, na forma sugerida, inclusive para nossa surpresa, por alguns dos principais livros textos da área, resultam em uma distribuição de equilíbrio não-Boltzmann e, portanto incorreta. Esta é uma das conclusões obtidas da continuação do trabalho "Estudo do comportamento da auto-agregação no modelo 'água-óleo' utilizando o método de Monte Carlo", apresentado na forma de poster no ano passado neste congresso (Shida e Henriques, XVIII ENFMC - 1995, pag. 97). Neste trabalho, utilizamos o conhecido modelo de Ising, em duas dimensões, com magnetização fixa, em redes pequenas. Comparamos as distribuições de equilíbrio obtidas de simulações para diferentes dinâmicas de troca de spin com a distribuição exata de Boltzmann, que é possível de ser calculada para rede pequenas ( $L=4$ ). Observamos que nem sempre a troca de Kawasaki mais "eficiente" leva à distribuição de equilíbrio de Boltzmann. É interessante notar, ainda, que na literatura existem muitos trabalhos a respeito de nucleação e crescimento que utilizam simulação de sistemas a concentração constante, no entanto, há poucos trabalhos que discutem os problemas e as limitações da simulação neste ensemble no caso de sistemas em equilíbrio termodinâmico.

(FAPESP)

## LEIS DE ESCALA ESPACIAL E TEMPORAL PARA UM BLOCO DESLIZANDO EM UMA SUPERFÍCIE RUGOSA

V. P. Brito

Departamento de Física, Universidade Federal do Piauí, 64049-550, Teresina-PI

M. A. F. Gomes e E. Montarroyos

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, Recife-PE

**Palavras-Chave:** leis de escala, deslizamento, rugosidade

Na última década tem ressurgido o interesse no estudo experimental da dinâmica sobre superfícies inclinadas, principalmente em conexão com criticalidade auto-organizada e fricção em fluxos granulares. Em particular, a distribuição de avalanches de grãos de areia e outros sólidos ou líquidos escoando sobre uma superfície inclinada podem dar origem a leis de potência não-triviais sobre amplas regiões das escalas espacial e temporal. Em trabalho anterior, estudamos o comportamento espacial do deslizamento de blocos cilíndricos de alumínio, latão, teflon e PVC sobre uma calha de alumínio, com evidência de lei de escala (1). Neste trabalho, apresentamos os resultados de reestudos da dinâmica de deslizamento dos mesmos blocos, agora sobre uma calha três vezes mais longa, com evidência de leis de escala espacial e temporal. Nesses experimentos eram obtidas seqüências de 500 deslizamentos,  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{500}$  e de tempos de deslizamentos,  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{500}$ , dos blocos, provocados por uma pequena perturbação externa na base da calha. As leis de escala observadas para as distribuições acumuladas foram  $N(\lambda_s) \sim \lambda_s^{-0.6 \pm 0.1}$  e  $N(\tau_s) \sim \tau_s^{-0.9 \pm 0.1}$ . Esses dados obtidos estão em concordância com a lei de Gutenberg-Richter (2), para a distribuição de terremotos sobre a crosta terrestre e com o modelo de propagação de *cracks* de Chen, Bak e Obukhov (3). A interface cilindro/plano em nosso experimento parece se comportar como a região de falhas sujeitas a stress de cisalhamento, neste último modelo.

(1) V. P. Brito e M. A. F. Gomes, Phys. Lett. A, 201, 38 (1995);

(2) B. Gutenberg e C. F. Richter, Ann. Geofis. 9, 1 (1956);

(3) K. Chen, P. Bak e S. P. Obukhov, Phys. Rev. A, 43, 625 (1991).

## SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DA RESSONÂNCIA ESTOCÁSTICA

Munir M. S. Sabag e Mario José de Oliveira

Depto. Física Geral, Instituto de Física, USP.

*Palavras-Chave:* ressonância estocástica, equação de Langevin

A parte inicial deste trabalho é o estudo analítico e numérico do movimento de uma partícula browniana sujeita a um potencial de duplo poço, a uma temperatura  $T$ . Foi determinada a distribuição estacionária de posições da partícula tanto teoricamente, resolvendo-se a equação de Fokker-Planck, como numericamente, através de simulação da equação de Langevin associada. Posteriormente, adicionou-se à hamiltoniana da partícula um termo correspondente a um campo externo fraco mas oscilante no tempo, e observou-se seu comportamento através de simulação numérica. Para uma faixa estreita de temperatura, a partícula salta entre os dois poços do potencial com frequência aproximadamente igual à do campo oscilante externo, fenômeno conhecido como *ressonância estocástica*. Em seguida, estudamos o mesmo fenômeno em um sistema de muitas partículas cuja hamiltoniana é dada por:

$$H(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_i \left( -\frac{a}{2} x_i^2 + \frac{b}{4} x_i^4 \right) + c \sum_{\langle ij \rangle} x_i x_j$$

onde a última somatoria é realizada sobre primeiros vizinhos. Os  $x_i$  podem tomar todos os valores reais, e o estado do sistema fica determinado por um determinado conjunto dessas variáveis. Nota-se que esse modelo, apesar de contínuo, tem uma analogia com o modelo de Ising. Foram realizadas simulações numéricas desse modelo na rede quadrada, e foram calculadas as grandezas análogas à magnetização e à susceptibilidade no modelo, de modo que pudemos observar uma transição de fase em uma temperatura crítica. Analisamos também este mesmo modelo sujeito a um campo externo oscilante no tempo, observando o fenômeno da ressonância estocástica.

(FAPESP)

## UNIVERSALIDADE NO MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO BIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES ALEATÓRIAS

F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz e R.R. dos Santos

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* modelo de Ising, sistemas desordenados, matrizes de transferência

A questão da universalidade em modelos de Ising desordenados em duas dimensões é considerada através do estudo de um modelo com interações ferromagnéticas aleatórias ("random-bond Ising model"). Os acoplamentos entre primeiros vizinhos obedecem à distribuição de probabilidade  $P(J) = \frac{1}{2}(\delta(J - J_0) + \delta(J - rJ_0))$ , onde  $r \leq 1$ . Longas faixas de larguras  $4 \leq L \leq 12$  são estudadas usando técnicas de matrizes de transferência, para  $r = 0.1, 0.25$  e  $0.5$ . São calculadas a energia livre e as funções de correlação entre spins, a partir das quais estimamos comprimentos de correlação médios  $\xi^{ave}$ . Através de derivadas numéricas (em relação à temperatura e ao campo externo) e usando técnicas de "finite-size scaling", obtemos estimativas dos expoentes críticos  $\gamma/\nu$  e  $\nu$ . Hipóteses de correções logarítmicas em  $\xi^{ave}$  são testadas e um comportamento crítico do mesmo tipo que o sistema puro ( $\gamma = 7/4, \nu = 1$ ) se verifica quando tais correções são incorporadas. Resultados preliminares para o modelo de Ising com diluição por sítios também indicam este comportamento. São então descartadas as hipóteses de universalidade fraca (expoentes variando com a desordem mas com a razão  $\gamma/\nu$  constante).

(CNPq, FINEP)

## UNIVERSALIDADE EM VIDROS DE SPIN

*Alexandre S. Ramos e J.R.L. de Almeida*

Departamento de Física  
Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE, Brasil

*Palavras-Chave:* vidros de spin, monte carlo, universalidade

Trabalhos recentes têm questionado sobre as técnicas tradicionais do grupo de renormalização e regras de universalidade utilizadas em sistemas uniformes quando aplicadas em sistemas desordenados, em particular nos vidros de spin. Neste trabalho fizemos cálculos de Monte Carlo em vidros de spin bidimensionais em uma rede quadrada utilizando o seguinte Hamiltoniano:  $H = -\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i$ , onde  $H$  é o campo magnético aplicado, e com os spins assumindo os seguintes valores  $S_i = +1$ , e  $S_i = 0, +1$ . Os valores de  $J_{ij}$ , que são as constantes de acoplamento entre os primeiros vizinhos, foram distribuídos aleatoriamente com distribuição de probabilidade gaussiana ou bimodal. A rede utilizada foi de  $60 \times 60$  com condições de contorno periódicas e para cada amostra os valores de magnetização eram obtidos fazendo uma média sobre oito amostras. A taxa de resfriamento foi de:  $dT/dt = 2 \times 10^{-5}$  J/MCS a fim de assegurar que  $M_{FC}$  (medido) fosse igual a  $M$  de equilíbrio. Como este modelo só apresenta uma transição de fase a uma temperatura nula ( $T_c=0$ ) e como existe um patamar de saturação na magnetização facilitando o cálculo da mesma para  $T \rightarrow 0$ , fizemos então gráficos da susceptibilidade magnética em função do campo aplicado para  $T \rightarrow 0$  e observamos uma divergência de acordo com uma lei de potência obtendo assim o expoente crítico associado  $\Delta$  e podendo compará-lo para as diferentes distribuições (gaussiana e bimodal) e para os diferentes graus de liberdade do spin ( $+1$  e  $0, +1$ ). O expoente  $\Delta$  depende da forma da distribuição de probabilidade dos  $J_{ij}$  e, para a mesma distribuição, independe do valor quântico do spin.

## CRITICAL DYNAMICS OF THE CONTACT PROCESS

### WITH QUENCHED DISORDER

*Adriana G. Moreira<sup>†</sup> and Ronald Dickman<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Física, UFMG, CP 702, CEP 30161-970, Belo Horizonte, Brazil

<sup>‡</sup>Department of Physics and Astronomy, Lehman College, CUNY, NY 10468-1589, USA

**Keywords:** contact process, quenched disorder, critical exponents

We study the two-dimensional contact process (CP) with quenched disorder in the form of random dilution of a fraction  $x$ . A qualitative picture of the phase diagram is obtained through mean-field theory. Monte Carlo simulations show that the relative shift in the critical point,  $[\lambda_c(x) - \lambda_c(0)]/\lambda_c(0)$ , is in reasonable agreement with MFT, for small values of  $x$ . As expected on the basis of the Harris criterion [J. Phys. C 7, 1671 (1974)], the critical exponents governing the order parameter and the survival probability take values different from those of the pure model. We also study the critical spreading dynamics of the diluted model. In the pure model, spreading from a single particle at the critical point  $\lambda_c(0)$  is characterized by the critical exponents of directed percolation: in  $2 + 1$  dimensions,  $\delta = 0.46$ ,  $\eta = 0.214$ , and  $z = 1.13$ . Disorder causes a dramatic change in the critical exponents, to  $\delta \simeq 0.60$ ,  $\eta \simeq -0.41$ , and  $z \simeq 0.24$ . These exponents govern spreading only after a long crossover period. The usual hyperscaling relation,  $4\delta + 2\eta = dz$ , is violated. Our results support the conjecture by Branson, Durrett, and Schonmann [Ann. Prob. 19, 960 (1991)] that the disordered CP has only a single phase transition in two or more dimensions.

(CNPq)

## MODELO DE SPINS MISTOS COM ANISOTROPIA ALEATÓRIA

*Josué Xavier de Carvalho e Silvio R. A. Salinas*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo

*Palavras-chave:* modelo de Ising, spins mistos

O diagrama de fases do modelo de Ising de spins mistos (spin-1/2 e spin-1) e anisotropia de campo cristalino foi detalhadamente estudado por Quadros e Salinas [Physica A 206, 479 (1994)]. Neste trabalho consideramos a versão de campo médio deste modelo na presença de um termo aleatório de anisotropia. O sistema é definido pela energia

$$\mathcal{H} = -\frac{2J}{N} \sum_{(i,j)} \sigma_i S_j + \sum_{j=1}^{N/2} D_j S_j^2,$$

onde  $J > 0$ ,  $\sigma_i = \pm 1$ , para  $i$  pertencente à sub-rede  $A$  do sistema,  $S_j = \pm 1, 0$ , para  $j$  pertencente à sub-rede  $B$ , e  $\{D_j\}$  é um conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com a deusidade de probabilidades

$$p(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1 - p)\delta(D_i),$$

onde  $D > 0$  e  $0 \leq p \leq 1$ . Para  $1 > p_0 > 88/91$ , há um diagrama de fases muito rico, com transições de primeira e de segunda ordem e um conjunto de pontos multicríticos. Abaixo de  $p_0$  existe apenas uma fronteira de transição de segunda ordem. Obtemos diversos resultados analíticos para o diagrama de fases. Também apresentamos alguns resultados exatos para uma versão bidimensional do modelo.

CNPq

## INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE E NÃO EXTENSIVIDADE EM MODELOS DE SPINS FERROMAGNÉTICOS

*Sergio A. Cannas e Francisco A. Tamarit*

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Universidad Nacional de Córdoba,  
Argentina

*Palavras-Chave:* interações de longo alcance, sistemas magnéticos, modelo de Ising

Existem muitos sistemas com interações microscópicas de longo alcance que apresentam comportamento não extensivo, ou seja, para os quais o limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$  (onde  $N$  é o número de componentes do sistema) não está bem definido (ex., sistemas de spins com interações tipo RKKY, o modelo de Ising cinético com troca de spins (random Levy flights), redes de neurônios, etc.). Neste trabalho nós apresentamos um estudo do modelo de Ising com interações ferromagnéticas de longo alcance que decaem como  $r^{-\alpha}$  e nos concentramos no estudo do comportamento do sistema na região de não extensividade  $0 \leq \alpha \leq d$ , onde o limite termodinâmico não está definido. Em particular, propomos uma generalização do modelo Curie-Weiss que permite reescalar os acoplamentos de forma tal que o limite  $N \rightarrow \infty$  esteja bem definido para qualquer valor de  $\alpha \geq 0$ . A teoria de campo médio para este modelo permite calcular a temperatura crítica  $T_c(\alpha)$ . Esta temperatura é exata para  $\alpha=0$  e  $\alpha \rightarrow d^+$  e nos conjecturamos a partir dos resultados obtidos que esta solução é exata também para todos os valores de  $\alpha$  na região não extensiva ( $0 \leq \alpha \leq d$ ). Esta conjectura é confirmada com uma simulação numérica Monte Carlo no caso  $d=1$ .

Nossos resultados confirmam, no modelo ferromagnético, um reescalamiento recentemente proposto por Tsallis no caso geral de sistemas com interações de longo alcance, o qual permite uma unificação dos regimes extensivo ( $\alpha > d$ ) e não-extensivo ( $0 \leq \alpha \leq d$ ).

## NEW RESULTS IN RIGIDITY PERCOLATION

**Cristian F. Moukarzel and Phillip M. Duxbury**

HLRZ-KFA Jülich, Germany and Michigan State University, USA.

Rigidity percolation on randomly diluted lattices is similar to the usual scalar percolation problem, but in this case a vector conserved quantity---a displacement---has to be transmitted through the lattice, the bonds of which can only transmit forces along the direction of their axis. Percolation of rigidity occurs at a bond concentration  $P_c$  which is higher than that of connectivity percolation. In spite of the differences between the two problems, it was usually expected that both belong to the same universality class. Previous numerical results were never enough to settle this question, as there were no efficient numerical methods to study rigidity percolation on large enough systems. Recent progress in the field of algorithms for graph rigidity enabled us to study the percolation of central forces on two-dimensional systems of sizes one order of magnitude larger than previously reachable. Our results on site- and bond-diluted triangular lattices of sizes up to  $L=1000$  show that rigidity percolation with central forces is not in the same universality class as the case of bond-bending forces. We furthermore find evidence, supported by analytically solvable models, that the rigidity transition is fundamentally different from the usual percolation transition. While usual percolation displays a second order transition, we have found strong numerical evidence that the rigidly connected cluster covers a finite fraction of the system at  $P_c$ , therefore being non-fractal. The rigidity percolation transition appears in this sense to be analogous to a first-order phase transition.

## UNIVERSALIDADE NO MODELO HEISENBERG QUÂNTICO

*J. Ricardo de Sousa*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UNB

**Palavras- Chave:** classe de universalidade, modelo Heisenberg, grupo de renormalização

Numa série de estudos, vários autores têm discutido a generalização do grupo de renormalização no espaço real (GR) em sistemas quânticos. O problema da não comutatividade dos operadores é o maior problema dos vários métodos de GR. Das hipóteses de universalidade, temos que os índices críticos não dependem dos detalhes do Hamiltoniano, e sim da simetria. No estudo do modelo Heisenberg anisotrópico (HA), temos que  $\Delta=0$  e  $\Delta=1$  correspondem os limites dos modelos Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente, enquanto no intervalo de  $\Delta$  entre 0 e 1, o sistema apresenta simetria Heisenberg [SU(3)]. Tem-se verificado na literatura que todos os métodos de GR apresentam uma dependência dos expoentes críticos com o parâmetro  $\Delta$ . Historicamente falando, existem dois modelos que quebram a classe de universalidade, um é o modelo Baxter de oito vértices e o outro o modelo ANNNI. Estes modelos não são solúveis exatamente, por isto existem fortes evidências que este comportamento não universal se deve as aproximações utilizadas. Apesar dos expoentes críticos dependerem dos parâmetros presentes nos respectivos modelos, é verificado na literatura que os expoentes renormalizados  $(2-\alpha)/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\delta$ , etc. apresentam comportamento universais. Neste trabalho, o modelo HA de spin-1/2 na presença de um campo magnético axial, é estudado pelo método de GR na aproximação de campo médio (MFRG) em clusters de tamanhos  $N=1,2,4$  e 8 spins. Os expoentes renormalizados foram obtidos para a rede cúbica simples, e é verificado uma universalidade para todos os tipos de renormalizações, resultado este em concordância com os resultados rigorosos de expansão em séries.

## CRITICALIDADE DO MODELO HEISENBERG DE SPIN-1/2

*José Ricardo de Sousa*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UNB

*Palavras-Chave:* sistemas quânticos, grupo de renormalização, transição de fase

Recentemente, vários métodos de grupo de renormalização (GR) no espaço real têm sido proposto na literatura para estudar a criticalidade de sistemas quânticos. Em muitos casos os métodos de GR apresentam resultados aproximados para as grandezas críticas, mas em geral eles são muito bons quando comparados com os resultados de expansão em séries. O grande problema de se aplicar os métodos de GR em sistemas quânticos, reside no fato da não comutatividade dos operadores envolvidos no Hamiltoniano do sistema. Neste trabalho, estudaremos a criticalidade do modelo Heisenberg de spin-1/2 numa rede  $d$ -dimensional. Inicialmente serão aplicados vários métodos conhecidos de GR no referido modelo e, posteriormente serão proposto dois novos métodos. Exponente crítico associado com o comprimento de correlação e parâmetro crítico, serão obtidos por estes dois novos métodos e comparados com os outros métodos conhecidos na literatura. Os dois novos métodos, consiste na combinação dos métodos de GR na aproximação de campo médio (MFRG) ou aproximação de campo efetivo (EFRG) com a dizimação. Para rede com  $d=2$ , os valores obtidos para as grandezas críticas, estão em excelente concordância com o resultado exato de Mermin e Wagner, enquanto que para  $d=3$ , os presentes formalismos apresentam resultados aproximados, mas em excelente concordância com os de expansão em séries. Os valores obtidos neste trabalho para  $d=3$ , mostra, quando comparados com os outros métodos de GR, a eficiência dos dois novos métodos, com um tempo computacional reduzido.

## TRICRITICAL POINTS FROM MEAN FIELD RENORMALIZATION

D. Peña Lara e J. A. Plascak

Departamento de Física - ICEX - UFMG

*Palavras Chave:* Renormalization Group, Tricritical Points, Blume-Capel Model

The mean field renormalization group (MFRG) method has proven to be efficient and easily applicable in the study of non-classical critical properties of lattice models (magnetic transitions and geometrical problems). It has been shown that quite good results are obtained even by considering the smallest possible clusters, such as the single site and the nearest neighbor pair. In this case, the critical couplings are equal to those obtained from Bethe and constant coupling approximation, with the critical exponents being non-classical. This approach, however, has only been suitable for studying second-order phase transitions. In this work, we propose an extension of the use of the MFRG in order to get, at least, the tricritical point (TCP) for models having first- and second-order transition lines. The TCP can be achieved by considering (besides the 1st-order) the 3rd-order term in the expansion of the order parameter with respect to the breaking field symmetry. While along the second-order transition line there is a scaling with non-zero anomalous dimension  $\phi$  for the order parameter, at the TCP scaling arguments and the suggestion that  $\phi = 0$  lead to another equation from the 3rd-order term of the order parameter allowing to obtain the TCP consistently. We have applied this procedure to the general spin Blume-Capel model and the anisotropic Heisenberg model with Dzialoshinsky-Moriya interaction and the results are in agreement with other RG approaches and Monte Carlo simulations and series expansions.

(CNPq, FAPEMIG)

## APLICAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO PARA ESTUDAR O MODELO $O(n)$ TRIDIMENSIONAL

*J. Ricardo de Sousa e D. F. de Albuquerque*  
Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UNB

*Palavras-chave:* grupo de renormalização, classe de universalidade, modelo  $O(n)$

Recentemente, o comportamento crítico do modelo clássico  $O(n)$  em três dimensões (3d) tem sido investigado por uma variedade de métodos estatísticos, tais como: expansão em séries, Monte Carlo, expansão- $\epsilon$ , teoria de campo efetivo, etc. Nos vários estudos no modelo  $O(n)$ , obtêm-se direta informações sobre os expoentes críticos e temperatura crítica. O modelo  $O(n)$  com  $n=2$  e  $n=3$  correspondem os limites XY e Heisenberg clássicos, respectivamente. No caso do modelo XY ou planar, tem-se utilizado para descrição do comportamento crítico do superfluido  $^4\text{He}$  e alguns sistemas magnéticos com simetria planar. O fato de que muitos materiais apresentarem spin  $S > 1/2$ , o limite clássico ( $S \rightarrow \infty$ ) é uma boa aproximação para  $T \geq T_c$ . A aproximação clássica consiste em transformar os operadores de spins da mecânica quântica em vetores clássicos com tamanhos fixos, mas livres para orientarem-se em alguma direção. A função de partição clássica é uma integral sobre o espaço de fase definido por um ângulo sólido avaliado para cada vetor de spin. O modelo  $O(n)$  unidimensional é solúvel exatamente, e é tratado ignorando os efeitos quânticos, que são cruciais na determinação das propriedades do sistema na região de baixa temperatura. Neste trabalho, generalizaremos os métodos do grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo e Migdal-Kadanoff para tratarmos o modelo  $O(n)$  3d. O expoente crítico e temperatura crítica são obtidos para  $n=2$  e  $n=3$ . Nossos resultados serão comparados com os valores obtidos por expansões em séries e Monte Carlo. Uma análise da classe de universalidade entre os modelos Heisenberg clássico e quântico, também será investigada, haja vista que, resultados rigorosos tem mostrado que ambos os sistemas pertencem a mesma classe de universalidade.

## BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL ON THE SQUARE LATTICE: A RENORMALIZATION-GROUP APPROACH

*Nilton da Silva Branco*  
Depto. de Física da Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-chave:* BEG model; critical phenomena; renormalization group

Using a real-space renormalization group procedure with no adjustable parameters, we investigate the Blume-Emery-Griffiths (BEG) model on the square lattice. The formalism respects sublattice symmetry, allowing the study of both signs of  $K$ , the biquadratic exchange coupling. Many of the symmetries contained in the model are exactly respected by the present formalism, although they are not *a priori* imposed. Our results for  $K > 0$  are compared with other renormalization group calculations and with exact results, in order to assess the magnitude of the errors introduced by our approximate calculation. The quantitative agreement is excellent: values for the critical parameters differ, in some cases, by less than 1% from exact ones. For  $K < 0$ , our results lead to a rich phase diagram, with antiquadrupolar and ferromagnetic ordered phases. Both antiquadrupolar-disordered and ferromagnetic-disordered transitions are found to be continuous and no ferrimagnetic phase is found. This phase is present in mean-field-like calculations; the discrepancy is expected, since mean-field approaches accurately describe high-dimensional systems, while our work is on the square lattice. Contrarily to Monte Carlo simulations, our calculation indicates that the two ordered phases meet only at zero temperature. This result respects the mapping between the BEG model with  $K = -3J$  ( $J$  is the bilinear exchange coupling) and  $\Delta = -8J$  ( $\Delta$  is the crystal-field interaction) and the antiferromagnetic three-state Potts model (which does not order at finite temperatures on the square lattice), while the Monte Carlo prediction implies the existence of an ordered phase for the latter model.

(CAPES, CNPq, FINEP)

## O MODELO DE BAXTER-WU: GENERALIZAÇÃO DO ANSATZ DE BETHE E SUA COMPLETEZA

F. C. Alcaraz e J. C. Xavier  
Universidade Federal de São Carlos - SP

*Palavras-Chave:* interação de multispin, Baxter-Wu, *ansatz* de Bethe

O modelo de Baxter-Wu é definido numa "rede" triangular com interações de três corpos; de variáveis tipo Ising circundando cada triângulo elementar da rede. Este modelo, assim como o modelo de Ising tradicional (dois corpos) é autodual, possuindo a mesma temperatura crítica  $2K\beta = \ln(\sqrt{2} + 1)$ . A solução exata, no seu limite termodinâmico foi obtida por Baxter-Wu ( Phys. Rev. Lett. 31,1294(1973) ). Tal solução foi obtida mapeando-se a sua função partição na de um modelo de coloração com 8 cores na rede hexagonal. Este último foi resolvido, no caso de condições periódicas de contorno, pelo *ansatz* de Bethe. Mostramos neste trabalho que o *ansatz* de Bethe utilizado é incompleto, isto é, apenas gera parte do espectro do modelo. O modelo de coloração possui uma simetria de paridade por troca de cores ( módulo 4 ). O *ansatz* original considera apenas as funções de ondas simétricas por tal simetria. Extendemos este *ansatz* para obter as funções de onda anti-simétrica, gerando outra parte do espectro. Mostramos que mesmo com o nosso *ansatz* generalizado ainda não obtemos o espectro completo. O modelo de Baxter-Wu possui uma simetria  $D(4)$  como o modelo de Potts com 4 estados, por isto acredita-se estarem ambos na mesma classe de universalidade, ou seja, possuem anomalia conforme  $c = 1$ . Compatível com sua simetria é possível definir-se o modelo com quatro condições toroidais de contorno distintas. Obtivemos o *ansatz* de Bethe para estas condições de contorno para o problema de cores correspondentes. A autodualidade do modelo pode também ser verificada a partir das equações do *ansatz* de Bethe obtidas, mostrando-se a equivalência do espectro para altas e baixas temperaturas.

( FAPESP, CNPq )

## EXPOENTES CRÍTICOS ASSOCIADOS A PONTOS DE LIFSHITZ

Carlos Mergulhão Júnior e Carlos Eugenio Imbassahy Carneiro  
Departamento de Física Geral-Instituto de Física-Universidade de São Paulo-SP

*Palavras-Chave:* pontos de Lifshitz, expoentes críticos, teoria de campos

A criticalidade de modelos que apresentam pontos de Lifshitz tem sido objeto de muitos estudos. Este tipo de ponto multicrítico surge em modelos com fases moduladas. Um dos modelos mais simples que apresentam pontos de Lifshitz é o modelo ANNNI que é constituído por um modelo de Ising em uma rede cúbica com interações ferromagnéticas ( $J_0 > 0$ ) entre os primeiros vizinhos ao longo de um plano (plano  $xy$ ) e interações ferromagnéticas ( $J_1 > 0$ ) competindo com interações antiferromagnéticas ( $J_2 < 0$ ) ao longo da direção ortogonal ao plano (eixo  $Oz$ ) anterior. No diagrama  $T \times p$  ( $p \equiv -\frac{J_2}{J_1}$ ) deste modelo, no ponto de Lifshitz, duas linhas de transição de fase de segunda ordem se encontram com uma de primeira. Estas linhas separam as fases: paramagnética, ferromagnética e modulada. A generalização deste modelo para outros com pontos de Lifshitz onde a competição ocorre num espaço  $m$  dimensional ( $1 \leq m \leq 8$ ) pode ser feita.

Um dos aspectos dos pontos de Lifshitz estudado por nós são os expoentes críticos. Os cálculos destes expoentes existentes na literatura, via o grupo de renormalização de Wilson, apresentam sérias discordâncias. Existem tais discrepâncias nestes cálculos pois foram feitas várias aproximações tornando os resultados pouco confiáveis. Neste contexto, realizamos os cálculos dos expoentes críticos  $\eta$  e  $\nu$  utilizando um método perturbativo do grupo de renormalização via funções de Green desenvolvido por Brèzin, J.Grillou e Zinn-Justin (1974). Este cálculo não envolve nenhuma aproximação. O cálculo destes expoentes foi desenvolvido no ponto de Lifshitz para o caso  $m = 6$  até ordem 2-loops via expansão  $\epsilon$ , resolvendo assim a controvérsia existente na literatura.

(FAPESP)

## TRANSIÇÃO DE FASE NUM MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL ANISOTRÓPICO

*M. Santos e W. Figueiredo*

Depto de Física - Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-Chave: transição, evolução, estacionário*

Neste trabalho estudamos o comportamento de uma rede quadrada de spins de Ising que está em contato com um reservatório térmico à temperatura  $T$ , e onde as interações de troca entre spins primeiros vizinhos nas direções horizontal e vertical são diferentes e podem competir entre si. Devido ao contato com o banho térmico, os spins do sistema podem sofrer transições entre os seus dois possíveis valores,  $\sigma_{i,j} = \pm 1$ .

Nós escrevemos a equação Mestra para este modelo considerando que a taxa de transição por unidade de tempo do sistema ir de um estado  $\{\sigma\}$  para outro  $\{\sigma'\}$  depende da temperatura do banho, das constantes de acoplamento e dos valores das variáveis dos spins envolvidos na transição. Em nosso caso, um único spin pode transicionar, no tempo  $t$ , do seu valor  $\sigma_{i,j}$  para  $-\sigma_{i,j}$ .

Utilizando-se, então, da equação Mestra e da probabilidade de transição por unidade de tempo, podemos obter equações diferenciais que governam a evolução temporal da magnetização e das funções de correlação de ordem  $m$  maior que 1. Como estas equações mostram dependência de funções de correlação de ordem maior que 1 e maior que  $m$ , respectivamente, é necessário realizar um truncamento, em algum ponto, para não ficarmos com um sistema infinito de equações diferenciais acopladas. Este procedimento é realizado via aproximação de pares, que trunca o sistema de equações em funções de correlação de ordem  $m = 2$ .

Após a determinação dos estados estacionários é possível obter um diagrama de fases para este modelo, no equilíbrio termodinâmico, que apresenta as fases paramagnética, ferromagnética e antiferromagnética. No limite em que um dos acoplamentos se anula, ou que sejam iguais, os resultados se reduzem àqueles conhecidos na literatura.

(CAPES/CNPQ)

## FASES MODULADAS NA PRESENÇA DE CAMPO NUM ANÁLOGO DO MODELO ANNNI NA REDE DE BETHE COM INTERAÇÕES INTRA-GERAÇÃO

*Fernando S. Milman e Marcelo H. R. Tragtenberg*

Depto. de Física da Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-chave: sistemas modulados, rede de Bethe, modelo ANNNI*

Moreira e Salinas (1993) propuseram dois análogos do modelo ANNNI na rede de Bethe, de forma que os planos ferromagnéticos são simulados pelas sucessivas gerações da rede de Bethe e as interações entre spins intra-planos é simulada por interações ferromagnéticas entre spins da mesma geração. Estas interações podem ser de curto alcance (CA), em que spins de uma mesma geração interagem entre si ao longo de uma cadeia linear, ou de longo alcance (LA), em que cada spin interage com todos os spins da mesma geração. Eles obtiveram diagramas de fases para o caso em que o campo magnético externo é zero. Este trabalho aborda o efeito do campo nos modelos. Estes modelos podem ser descritos por mapeamentos bidimensionais nas magnetizações das camadas da rede de Bethe, quando tomamos o chamado limite de coordenação infinita, que consiste em fazer as interações tender a zero e o número de coordenação tender a infinito, mantendo o produto constante. Estudamos os atratores dos mapeamentos e levantamos diagramas de fases para alguns valores do campo magnético externo. Os métodos utilizados para levantar estes diagramas de fases foram vários: estudo do limite de estabilidade dos pontos fixos paramagnéticos, procedimento baseado no método de Newton para obter fases comensuráveis "razoavelmente largas" e método de minimização de uma função que mede a distância entre uma condição inicial e a  $N$ -ésima iteração do mapa associado ao modelo, para determinar fases comensuráveis "muito estreitas". Eles se encontram descritos em detalhe em artigo de Tragtenberg e Yokoi (1995). Os diagramas de fases são extremamente ricos, registrando a ocorrência de pontos tricríticos, regiões de co-estabilidade de fases, atratores estranhos além de arranjos complexos entre fases moduladas comensuráveis.

## MODELO DE ISING EM ALTAS TEMPERATURAS SUJEITO A UM FLUXO EXTERNO DE ENERGIA

*Bartira C. S. Grandi e Wagner Figueiredo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis - SC

*Palavras-Chave:* modelo de Ising, propriedades críticas, simulações de Monte Carlo

Neste trabalho estudamos o modelo de Ising ferromagnético numa rede quadrada, na região de altas temperaturas. O modelo por nós considerado é um sistema fora do equilíbrio, estando submetido a um fluxo externo de energia. Neste modelo, o fluxo externo de energia pode ser descrito através de um processo do tipo Kawasaki, onde o acréscimo de energia do sistema é reproduzido pela troca entre spins que são primeiros vizinhos. A interação com o banho térmico se dá com uma taxa de transição para a inversão de um único spin igual a  $1/2$ . Efetuamos simulações de Monte Carlo com  $L$  variando entre 8 e 128, sendo  $L$  a dimensão linear do sistema. Calculamos para esse sistema a magnetização, a susceptibilidade magnética e os cumulantes de quarta ordem em função do parâmetro que nos dá a probabilidade do sistema absorver energia do agente externo. Mostramos que esse sistema sofre uma transição de segunda ordem para determinado valor crítico deste parâmetro, passando de um estado estacionário paramagnético a um outro, ordenado, de natureza antiferromagnética. Ou seja, quando a probabilidade do sistema absorver energia torna-se suficientemente grande, surge uma estrutura auto-organizada a partir de um dado valor crítico da probabilidade acima mencionada. Utilizando relações de escala para sistemas de tamanho finito, determinamos os expoentes críticos associados ao comprimento de correlação, à magnetização e à susceptibilidade magnética. Mostramos que os valores desses expoentes críticos no estado de não-equilíbrio estão na mesma classe de universalidade que os correspondentes de equilíbrio para o modelo de Ising bidimensional. Finalmente, mostramos que o nosso sistema é equivalente ao modelo do voto majoritário isotrópico em uma rede quadrada.

(CNPq e FINEP)

## GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO FENOMENOLÓGICO APLICADO AO MODELO DE GOLDSCHMIDT

*A. C. da Silva Filho e J. R. Drugowich de Felício*  
Departamento de Física e Matemática  
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

*Palavras-Chave:* multicriticalidade, finite-size-scaling, invariância conforme

O modelo de Goldschmidt é constituído por três sistemas de Ising acoplados entre si por interações anisotrópicas de 4 spins (no caso particular de interações isotrópicas recupera-se o modelo de Ashkin-Teller de 3 cores). Baseado no estudo das equações do grupo de renormalização para o modelo, que são semelhantes àquelas obtidas para o modelo XY bidimensional, o autor sugere a existência de um ponto multicrítico tipo Kosterlitz-Thouless no seu diagrama de fases. Para localizar o tal ponto KT, Goldschmidt no entanto, recorreu à aproximação de campo médio. Mais tarde, Chahine e colaboradores usaram Monte Carlo Renormalization Group (MCRG) para investigar esse modelo e chegaram à conclusão de que o diagrama de fases obtido pelo autor apresenta erros. Eles não foram capazes de definir, no entanto, se isso seria suficiente para impedir a existência do ponto multicrítico. No presente trabalho, a diagonalização exata da matriz de transferência foi efetuada para sistemas pequenos e as fases foram obtidas através do cruzamento do comprimento de correlação e da análise da simetria dos autovetores correspondentes. Essa análise suporta os resultados previamente obtidos por MCRG. Além disso, argumentos de invariância conforme foram utilizados para estudar o comportamento dos índices críticos ao longo das linhas de transição de segunda ordem. Os resultados até aqui obtidos ainda não são suficientes para garantir a ausência do ponto KT.

(CNPq, CAPES e FAPESP)

## LOCALIZATION IN RANDOM HARMONIC CHAINS WITH THERMAL CORRELATIONS

*José C. Cressoni and Marcelo L. Lyra*

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

**Key Words:** Localization, Thermal Correlations, Scaling Behavior

The interest in the transport properties of 1D systems exhibiting correlated disorder has grown in the last few years. The very existence of extended states violates Anderson's rule, according to which the eigenstates should be localized even for an infinitesimal amount of disorder. Most of the models of correlated disordered chains introduce correlations by allowing the constituent clusters to have an internal fixed structure. Delocalized modes appear then as resonant modes of such structures which exhibit no backscattering. In one-dimensional disordered harmonic chains the presence of the  $\omega = 0$  uniform mode is responsible for the emergence of  $\sqrt{N}$  extended low-frequency vibrational modes. In the random dimer harmonic chain model, besides these low-frequency extended modes, an additional set of  $\sqrt{N}$  modes may be extended around a special frequency  $\omega_0$ , provided that  $\omega_0$  belongs to the common band of the constituent atoms.

In this work we investigate the nature of the vibrational modes of a random binary and random dimer harmonic chains with site correlation for which an annealing temperature  $T$  is used as a disorder controlling parameter. The total number of sites used in our simulation was  $N = 5000$ , and we performed 5000 runs over the entire chain in order to achieve thermal equilibrium. The localization length was obtained by averaging over 100 configurations of the final quenched site distribution. In the small temperature regime one finds that the localization length  $L_c$  does not scale with  $T$  like the mean cluster size  $\xi_c \propto e^{a/T}$  but follows a power law scaling. Furthermore, the power law exponent varies continuously with the mode frequency. As a function of both the frequency and temperature, the localization length curves can all be collapsed down to a universal function of the frequency, namely  $f(\omega) = L_c(\omega, T)T^{(\mu_1 + \mu_2\omega^2)}$ , with  $\mu_1 = 2.1 \pm 0.1$  and  $\mu_2 = 1.1 \pm 0.1$ .

## MÉTODO DE MONTE CARLO PARA UM MODELO DE ISING EM CAMPO TRANSVERSO COM CAMPO MAGNETICO OSCILANTE

*M. Santos; T. Tomé e M.J. de Oliveira*

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** Ising campo transverso, Monte Carlo, estado fundamental

Nós temos investigado o comportamento de um sistema de spins de Ising unidimensional cuja interação ferromagnética entre os spins primeiros vizinhos ocorre na direção  $z$ . Além do mais, os spins do sistema estão sujeitos à duas espécies de interação com campos externos. Um destes é um campo constante no tempo, que interage com os spins numa direção transversal a  $z$ , a direção  $x$ . Este termo representa o ruído quântico. O outro é um campo magnético dependente do tempo, de forma periódica, e interage com os spins na direção  $z$ . Se este último campo for nulo, o sistema é conhecido como modelo de Ising num campo transverso. Assim sendo, a Hamiltoniana é representada por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,i+1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x - H(t) \sum_i \sigma_i^z$$

onde  $\sigma^x$  e  $\sigma^z$  são matrizes de Pauli,  $H(t) = h_0 \cos \omega t$  e para efeitos práticos consideramos  $J = 1$ . Nosso interesse neste modelo reside na obtenção de grandezas físicas para um valor específico da temperatura,  $T = 0$ .

Um método bastante adequado para resolver este tipo de problema é o algoritmo de Monte Carlo recentemente desenvolvido com o objetivo de obter as propriedades do estado fundamental, e dos primeiros estados excitados, de sistemas quânticos de spins [1].

A simulação nos mostrou que a magnetização por spin oscila periodicamente no tempo com a mesma frequência do campo magnético externo, porém retardada. Notamos, além disso, que para determinados valores das amplitudes do campo magnético e do campo transverso podemos, através da transformada de Fourier da magnetização dependente do tempo, obter as fases paramagnética e ferromagnética.

[1]- M.J. de Oliveira, Phys. Rev. B 48, 6141 (1993)

(CAPES)

## MODELO ANNNI NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO

Francisco Ferreira Barbosa Filho

Departamento de Física - Universidade Federal do Piauí

Carlos Seihiti Orri Yokoi

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** Sistemas modulados, modelo ANNNI, diagramas de fases

Estudamos o modelo ANNNI na presença de campo magnético  $H$  a temperatura finita ( $T \neq 0$ ) [Yokoi *et al.*, 1981, *Phys. Rev.* **B24**, 4047 e referências aí citadas]. Examinamos o comportamento das estruturas e contornos das fases moduladas para os diagramas  $p - T$  a  $H$  constante e diagramas  $H - T$  a  $p$  constante. O parâmetro  $p = -J_2/J_1$  mede a competição entre as interações ferromagnéticas ( $J_1$ ) e interações antiferromagnéticas ( $J_2$ ) ao longo da direção axial. Usando o método numérico de Newton em conjunto com o método de ramificações e bifurcações [Selke e Duxbury, 1984, *Z. Phys.* **B57**, 49] determinamos os contornos das fases. O método de potenciais efetivos [Chou e Griffiths, 1986, *Phys. Rev.* **B34**, 6219] foi usado na determinação das formas das estruturas e como ferramenta exploratória na determinação dos contornos das fases.

A campo finito o contorno dos diagramas  $p - T$  a  $H$  constante são bem diferentes daquele a campo nulo. Para  $H$  crescente há a predominância (largura de estabilidade) das fases de períodos ímpares sobre as de períodos pares. Para  $H$  suficientemente alto as fases sofrem mudanças de estrutura (transições entre fases de mesmo período). Estas mudanças são observadas através de pontos de estrangulamentos nos contornos das fases.

Determinamos os diagramas  $H - T$  a  $p$  constante para valores que vão desde  $p = 0.4$  até  $p = 4.0$ . A forma destes diagramas é bastante complexa, especialmente aqueles para  $p = 0.5 \pm 0.15$ . O nosso estudo mostra evidências numéricas para a existências de estruturas como o ponto  $\Upsilon$  [Bassler *et al.*, 1991, *J. Stat. Phys.* **62**, 45], bem como transições quase-contínuas, linhas de multifases, estruturas comumente encontradas em modelos tipo Frenkel-Kontorova estendidos [Bassler e Griffiths (1994), *Phys. Rev.* **B49**, 904].

(CAPES/PICD)

## MODELO XY QUIRAL CLÁSSICO COM TERMO DE ANISOTROPIA CRISTALINA NUM CAMPO MAGNÉTICO

Nelson Alves Junior e Carlos Seihiti Orri Yokoi

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo

**Palavras Chave:** Sistemas modulados, modelo XY, diagramas de fases

Consideramos um modelo unidimensional de spins planares clássicos, com interações quirais entre vizinhos mais próximos, na presença de um campo magnético. Limitamo-nos ao zero absoluto da temperatura. A energia do modelo é dada por

$$E(\{\theta_n\}) = \sum_n [W(\theta_n - \theta_{n-1}) + V(\theta_n)],$$

onde

$$W(x) = 1 - \cos(x - \Delta) \text{ e } V(x) = H(1 - \cos x) + K[1 - \cos(6x)].$$

$\theta_n$  é o ângulo entre o vetor de spin no  $n$ -ésimo sítio e o campo aplicado  $H$ ,  $\Delta$  é o parâmetro de quiralidade e  $K$  é a magnitude do termo de anisotropia cristalina.

O parâmetro  $\Delta$  corresponde ao ângulo formado entre spins sucessivos, na ausência de campo, para que a energia de interação seja minimizada. O campo  $H$  tende a alinhar spins, enquanto a anisotropia tende a alinhar os spins nas  $2\pi n/6$  ( $n = 0, 1, 2, \dots, 5$ ) direções favorecidas. Assim existem 3 efeitos competitivos: a quiralidade  $\Delta$ , o campo aplicado  $H$  e a anisotropia  $K$ . Essa competição ou frustração leva ao surgimento de fases moduladas no modelo.

Neste trabalho estudamos a influência do parâmetro de anisotropia  $K$  sobre o diagrama de fases, em particular os limites  $K = 0$  e  $K \rightarrow \infty$ . Discutimos as diversas características dos diagramas de fases com especial ênfase na natureza das transições e pontos especiais (superdegenerados ou  $\Upsilon$ ). O método empregado foi o dos potenciais efetivos que baseia-se na solução de uma equação de autovalores aditiva [Chou, W. e Griffiths, R. B. (1986) *Phys. Rev.* **B 34**, 6219].

## FERROMAGNETO DE ISING COM CAMPO EM REDES HIERÁRQUICAS: TERMODINÂMICA E PROPRIEDADES CRÍTICAS

*Osmundo Donato S. Neto e Sérgio Coutinho*  
Departamento de Física – UFPE

*Palavras-Chave:* expoentes críticos, redes hierárquicas, ferromagnetismo

O comportamento crítico de um ferromagnético de Ising submetido a um campo magnético externo uniforme foi investigado considerando-se o sistema definido sobre um conjunto de redes hierárquicas genericamente conhecido como *Hierarquias de Migdal-Kadanoff*. Generalizando o método proposto em [1] para incluir os efeitos do campo externo, obtivemos um conjunto de equações de recorrência acopladas exatas envolvendo a função de correlação de pares de vizinhos e a magnetização local de sítios pertencentes a gerações anteriores de uma rede hierárquica de dimensão arbitrária. Este procedimento recursivo foi aplicado para calcular diretamente a magnetização local em cada sítio do sistema definido nas redes tipo diamante com dimensão de grafo 2, 3 e 4. Verificamos que as propriedades multifractais da magnetização local são significativamente afetadas sob ação do campo aplicado, em temperaturas próximas do ponto crítico, quando comparadas com aquelas obtidas a campo nulo [1]. Através das magnetizações locais e das correlações entre pares vizinhos determinamos o comportamento de funções termodinâmicas como a magnetização global, o calor específico e a susceptibilidade magnética, assim como do comprimento de correlação em uma larga faixa de valores da temperatura que inclui as fases ordenada e desordenada do sistema, e para diversos valores do campo aplicado. Além disso, foram calculados numericamente os expoentes críticos  $\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma$ , e  $\nu$  correspondentes às grandezas termodinâmicas supramencionadas, para as redes consideradas.

[1] W.A.M. Morgado, E.M.F. Curado e S. Coutinho, *J. Stat. Phys.* 61, 913 (1990).

[2] S. Coutinho, O. Donato-Neto, J.R.L. de Almeida, E.M.F. Curado e W.A.M. Morgado, *Physica A*, 185, 271 (1992). Edvaldo Nogueira Júnior, Tese de Doutorado (1996-Depto. de Fis./UFPE)

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE PROPRIEDADES ESTÁTICAS E DINÂMICAS DE FILMES MAGNÉTICOS ACOPLADOS

*Carlos Chesman, Sergio Rezende, Antonio Azevedo e Flavio de Aguiar*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil

**Palavras-chave:** Filmes finos magnéticos, Magnetização, Ondas de spin

Neste trabalho são estudados processos de magnetização em tricamadas magnéticas. As propriedades estáticas são caracterizadas por medidas de efeito Kerr magneto-óptico (MOKE) e por curvas de magneto-resistência (MR), enquanto as propriedades dinâmicas são caracterizadas por medidas de ressonância ferromagnética (FMR) e espalhamento Brillouin (BLS). Apresentamos um modelo que explica as curvas de magnetização (MOKE e MR) e as relações de dispersão de ondas de spin (FMR e BLS) nesses sistemas, baseado na linearização da equação de movimento de Landau-Lifshitz. O modo uniforme, medido por FMR, e os modos de ondas de spin, medidos por BLS, são os auto-modos calculados a partir da equação linearizada, supondo pequenos desvios das magnetizações em relação à configuração de equilíbrio. A dependência com o vetor de onda é introduzida através de um campo dipolar efetivo. A configuração de equilíbrio é determinada numericamente através da minimização da energia livre. Para a energia livre consideramos as seguintes contribuições: Zeeman, anisotropia cúbica, anisotropia uniaxial, acoplamento entre as camadas (bilinear e biquadrático), anisotropia de superfície, dipolar e desmagnetização. Somente os quatro primeiros termos são envolvidos na determinação da configuração de equilíbrio das magnetizações. No entanto, todos os sete termos são importantes para o cálculo das relações de dispersão. A magnetização e a MR são proporcionais a  $(\cos\phi_1 + \cos\phi_2)$  e  $\cos(\phi_1 - \phi_2)$ , respectivamente, onde  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são os ângulos que minimizam a energia livre. Serão apresentados resultados numéricos em bom acordo com resultados experimentais em diversos sistemas.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE)

## ESTUDO DE ANISOTROPIAS DE INTERFACE EM MULTICAMADAS DE Co/Pd POR FMR

J.A. Romano<sup>1</sup>, E.C. da Silva<sup>1</sup>, L.F. Shelp<sup>2</sup>, J.E. Schmidt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Cx.P. 6165, 13083-970 Campinas (SP), Brasil.

<sup>2</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS Cx. P. 15051, 91 501-970 Porto Alegre (RS), Brasil

**Palavras-Chave:** multicamadas, ressonância ferromagnética, anisotropia magnética

Filmes de multicamadas tem sido um importante objeto de estudo nos últimos anos, devido à sua possível aplicação como meio magneto-óptico de gravação. Dentre os tipos de filme, um que tem despertado atenção é o sistema de Co/Pd, devido à sua forte anisotropia magnética que em alguns casos favorece uma magnetização perpendicular ao plano do filme. Esta forte anisotropia é causada pela anisotropia de superfície nas interfaces de Co/Pd, cuja origem não é ainda bem conhecida. Neste trabalho estudamos com a técnica da FMR, multicamadas de Co/Pd (12/45 Å) e (19/45 Å) que foram depositadas em substrato de Si (111). Estas amostras foram preparadas e já caracterizadas por outras técnicas pelo grupo de física da UFRGS. Apesar de sua policristalinidade, uma texturização na direção (111) foi observada. Foram feitas medidas de FMR em vários ângulos do campo externo com relação ao plano do filme a fim de se determinar as anisotropias magnéticas efetivas das amostras. A multicamada Co/Pd 12/45 Å sofreu implantação de Ar<sup>+</sup> a diferentes dosagens com o objetivo de distinguir a contribuição das interfaces de Co/Pd nas propriedades magnéticas do filme. Com os dados de FMR pudemos determinar as constantes de anisotropia do filme. Analisamos também a evolução destas grandezas em função da dosagem de Ar<sup>+</sup> implantado, o que nos levou às seguintes hipóteses para as duas linhas de ressonância observadas: coexistência de duas estruturas cristalinas para o átomo de Co (hcp e fcc), ou ainda, uma das linhas (a de maior anisotropia) ser causada por átomos de Co próximo à interface de Co/Pd sob a influência da forte anisotropia de superfície, enquanto a outra seria devido a átomos de Co mais interno à camada. A destruição das interfaces pela implantação de Ar<sup>+</sup> com a consequente diminuição da anisotropia magnética, como foi constatado, corrobora com as duas hipóteses levantadas.

## EFEITOS DA RUGOSIDADE E TAMANHO DE PARTÍCULAS NA CONDUÇÃO ELÉTRICA DE MULTICAMADAS DE Co/Ag

*Gustavo J. B. Rodriguez, Marinês G. M. Miranda, Arlei B. Antunes e Mario N. Baibich.*  
Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, Brasil.

*Palavras-Chaves:* multicamadas, resistividade elétrica, rugosidade.

A resistividade elétrica e principalmente a magnetorresistência de multicamadas e granulares magnéticos depende fortemente do grau de ordem nas interfaces entre os diferentes elementos. Em particular, a Magneto Resistência Gigante que estas estruturas exibem está, segundo a maioria das teorias correntes, intimamente ligada à rugosidade das interfaces. Investigamos a relação entre a mudança na Magneto Resistência Gigante e a qualidade das interfaces em uma série de amostras multicamadas do tipo Co(15Å)/Ag(45Å) obtidas por deposição alternada de Co e Ag no Laboratório de Filmes Finos do Instituto de Física da UFRGS, utilizando a técnica de *RF-sputtering* com baixas taxas de deposição. Foram realizados estudos da rugosidade em função de diferentes tratamentos térmicos nas seguintes faixas de temperatura: 200 °C, 250 °C, 300 °C, 350 °C, 400 °C e 450 °C. A rugosidade foi medida por meio de estudos em microscopia eletrônica de tunelamento, supondo uma distribuição uniforme de defeitos nas diversas interfaces para obter, além da componente normal do deslocamento dos ions, a correlação lateral entre estes. As amostras foram também analisadas por difração de Raios-X para determinação das estruturas e interfaces obtidas. A dependência da resistividade com a temperatura, a baixas temperaturas (entre 20 e 50 K principalmente) mostra um termo proveniente do espalhamento elétron-fónon. Este termo é dependente, assim como a magnetorresistência, do grau de desordem nas interfaces, e seguem o comportamento observado para o desvio quadrático médio das interfaces associado à correlação lateral, segundo o modelo de Moraga. Estas informações, aliadas às medidas de Magneto Resistência Gigante e resistividade elétrica entre 4,2 °K e 300 °K, estabelecem uma relação entre a qualidade das interfaces e as propriedades de transporte eletrônico.

(CNPq, FINEP, PADCT)

## SIZE EFFECTS ON SPIN REORIENTATION IN RARE EARTH SUPERLATTICES

*V.D.Mello and A.S.Carriço*  
Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, UFRN  
Campus, 59072-970 Natal-RN

*Palvras chave:* rare earth, size effects, multilayers

The good match between components of rare earth superlattices and the similarity in the electronic extended states has motivated a considerable research effort in these systems. In superlattices very large coherence has been observed from neutron scattering measurements. Also the Néel temperature do not show strong variations. New phases have been observed and the results explained within a simple theoretical frame. The observed down shift of the ferromagnetic transition temperature of helimagnets, like Dy, when in multilayers, allows interesting combinations that involve materials with distinct magnetic phases at low temperatures. We present the results of a study of a model system that should resemble the magnetic phases of Ho/Dy superlattices at low temperatures. These materials have opposite sign of the c-axis anisotropy. A competition between the trends imposed by each material may lead to new phases, where spin reorientation in one component may be size induced as a result of the excess of anisotropy content of the opposite kind in the superlattice. The theoretical model consists of a superlattices where, at low temperatures one component is intrinsically conical while the other is helimagnetic. An effective interface exchange interaction is introduced in order to study the effect of the layering pattern in the equilibrium phases. In general we find nonuniform phases corresponding to interface effects. The structure is roughly a mixture of conical and helimagnetic phases, with a smooth transition near the interfaces for superlattices of long periods. The predominance of one component over the other, for a given layering pattern, may be seen from jumps in the magnetization for external fields applied in general directions in the basal plane or along the c-axis.

## RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA DE FILMES FINOS DE COBALTO

*F. Pelegrini\**, *J. E. Schmidt\**, *L. F. Schalp\**

\*Departamento de Física - Universidade Federal de Goiás

+ Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*Palavras Chaves:* filmes magnéticos, anisotropia magnética, ressonância

Na caracterização de filmes magnéticos, a técnica de ressonância ferromagnética (RFM) é particularmente adequada para o estudo da anisotropia magnética e também do acoplamento intercadas. Neste trabalho empregamos a técnica de RFM para investigar a anisotropia magnética de filmes de monocamadas e tricamadas de cobalto, produzidos por deposição de vapor em vácuo. As camadas de cobalto foram depositadas sobre substrato de silício oxidado, com taxa de deposição da ordem de 1 Å/s, controlada por oscilador de quartzo. Foram investigadas monocamadas com espessuras de 50, 200 e 610 Å, e tricamadas com camadas de cobalto de 30 e 50 Å, separadas por camada de óxido de silício (30, 45 e 60 Å). Os valores obtidos para o campo de ressonância variam de 670 G, quando o campo magnético aplicado é paralelo ao filme, a 15800 G, quando o campo aplicado é perpendicular ao filme. Para as tricamadas observam-se dois modos de ressonância, de volume e de interface, que são investigados em função da espessura da camada separadora. Os valores deduzidos para a anisotropia magnética estão de acordo com medidas realizadas com magnetômetro de torque. O acoplamento intercadas é discutido considerando também resultados referentes a sistemas de multicamadas

## UM REFRIGERADOR DE DILUIÇÃO PLÁSTICO EM MINIATURA

*V. Bindilatti\**, *N.F. Oliveira Jr.\**, *R.V. Martin\** e *G. Frossati<sup>b</sup>*

\* Instituto de Física da Universidade de São Paulo - SP, Brasil

<sup>b</sup> Kamerlingh Onnes Laboratorium, Univ. de Leiden - Holanda

*Palavras-Chave:* refrigerador de diluição He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup>

Recentemente, uma nova técnica para construção de refrigeradores de diluição foi implementada, em que se emprega quase que exclusivamente materiais plásticos. O formato tubular e compacto deste novo tipo de refrigerador possibilita a construção de unidades extremamente pequenas que poderiam ser empregadas em uma variedade de situações experimentais. Neste trabalho apresentamos os resultados de uma tentativa bem sucedida de construir um refrigerador de diluição miniaturizado. A unidade que construímos e testamos é completamente contida dentro de um tubo plástico (PVC) com 10mm de diâmetro e 170mm de comprimento. O espaço experimental disponível no interior da câmara de mistura pode acomodar amostras de até 6mm de diâmetro. Como trocador de calor empregamos uma espiral de tubo capilar de CuNi, com uma área de troca de 25cm<sup>2</sup>. Temperaturas inferiores a 50mK foram obtidas com taxas de circulação de He<sup>3</sup> abaixo de 70µmol/s. Devido à pequena quantidade de mistura de He<sup>3</sup>/He<sup>4</sup> envolvida, os processos de condensação e resfriamento são extremamente rápidos. As temperaturas mais baixas podem ser atingidas em menos de 10 minutos após o início da circulação. Apresentaremos os detalhes de construção do refrigerador e os resultados dos ensaios efetuados. A potência frigorífica medida a 100mK e 63µmol/s foi de 45µW. A temperatura mínima obtida com a unidade testada foi de 43mK.

## THE KINETICS OF THE TRANSFORMATION OF CoCu HETEROGENEOUS RIBBON BY ANNEALING

*Marines G. M. Miranda<sup>1</sup>, Marcelo Knobel<sup>2</sup>, Mario N. Baibich<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil

<sup>2</sup>Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* amorphous, kinetics, granular

The granular ribbons of composition  $\text{Co}_{10}\text{Cu}_{90}$  show giant magnetoresistance (GMR) when heat treated. The usual treatment to achieve the largest GMR is an anneal at around  $500^\circ\text{C}$  for 1 hour in an inert atmosphere. Another approach with better results was obtained by R. H. Yu *et al* (J Appl. Phys. 78 (8) pp. 5062 (1995)) using "flash annealing", where high temperatures are reached in a very short period of time. The drawback of this later method is that one does not have the control over the Co precipitates. In order to understand the kinetics of the transformation of the original ribbon into the aggregate with ideal Co cluster size and distribution for maximum GMR, we have measured the resistivity of these materials during the anneal at different temperatures or different heating rates, based on the assumption that, even in the case of Joule self-heating, the thermodynamic parameters do transfer from one type of treatment to the other. An additional parameter is needed for the interpretation of the experiments: the temperatures in flash annealing cannot be directly determined, so an equivalent was established on the basis of the sample's magnetic behavior. From these measurements it becomes clear that segregation of Co in the Cu matrix can be associated to an equivalent activation energy, thus allowing to have a general "transformation rate equation" similar to those established for chemical reactions. The characteristic distribution of grain sizes is different in both cases, leading to different GMR; the above mentioned distribution can be verified indirectly by measurements of the thermoelectric power of the different samples (see A. B. Antunes *et al*, this conference).

(CNPq, FINEP, PADCT)

## THE EFFECT OF CONFINEMENT ON MAGNON POLARITONS IN SUPERLATTICES OF ANTIFERROMAGNETS

*Thomas Dumelow<sup>1</sup> and Marcilio C. Oliveros*

Departamento de Física, UFRN.

*Key-words:* antiferromagnet, superlattice, magnon.

There have been a number of recent theoretical studies relating to magnon polaritons in superlattices of antiferromagnetic materials. Magnon frequencies of antiferromagnets are typically in the far infrared and have wavelengths far longer than any superlattices period likely to be encountered in practice. One may consider the superlattice as a single anisotropic medium. Previous studies have also used a bulk slab approach, i.e. considered each layer to retain the properties of the original bulk material. In practice, however, this may not give an accurate picture for realistic superlattices because the excited modes are likely to be pinned at the superlattice interfaces, thus creating a series of discrete confined modes - such modes have been observed experimentally in antiferromagnetic films as thick as  $1\ \mu\text{m}$ . In order to fully model of the effect of confinement on a superlattice permeability tensor one would require a microscopic treatment over the complete superlattice period. However, in this work we take a much simpler approach, using only bulk properties, which should accurately model the effects of confinement providing the superlattice layers are not too thin (a few lattice periods). We assume the modes to be completely pinned at the interfaces, so that the pure modes would take the form of simple cosine waves. The expression for the superlattice permeability tensor thus obtained is simple to use and requires only the substitution of the appropriate parameters. We apply this model to an  $\text{FeF}_2/\text{ZnF}_2$  superlattice, and calculate oblique incidence reflectivity spectra for the anisotropy axis along three different directions. We find that such spectra show a wealth of detail, and are radically affected both by the anisotropy direction and by the polarisation of the incident light. The spectra are further affected by deposition of the superlattice onto a substrate.

## MAGNETIC HYPERFINE FIELD OF $^{57}\text{Fe}$ IN VAPOR QUENCHED FILMS OF $^{57}\text{Fe}(5\%):\text{RE}$ (RE = Dy, Ho, Er, Tm AND Yb)

E. C. Passamani, M. M. Torres, E. Baggio-Saitovitch and H. Micklitz \*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud 150, 22290-180 -RJ.

\* Visitor from Physikalisches Institut Universität Köln, Germany.

**Keywords:** Films, Magnetic properties, Mössbauer spectroscopy

The magnetic behavior of 3d-impurities in rare-earth metals (RE) is a classical problem and the basic physics of the interaction mechanisms involved have been understood for some time. Since the transition metal (TM) magnetism (3d-itinerant) and the RE-magnetism (4f-localized) are completely different, a mixture of them can give rise to an interesting magnetic behavior, making the study of such systems especially interesting. However, only a few number of these very dilute TM impurity in RE matrices are experimentally available. In this work, we combine vapor quenching technique at low temperature (20K) and *in situ*  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectroscopy at different temperatures (7 - 300 K) to study out-of-equilibrium solubility and magnetic properties of  $^{57}\text{Fe}(5\%)$  in some heavy rare-earth (RE) metals (RE = Dy, Ho, Er, Tm and Yb). The spectra were fitted using the full Hamiltonian including electric quadrupole and magnetic interactions, since both are of the same order of magnitude. Two magnetic components are observed in the 7K Mössbauer spectra: one with a magnetic hyperfine field ( $B_{\text{hf}}$ ) varying between 5.6(2) and 1.9(2) T, that has been attributed to Fe at a substitutional site, and the other one, with a very small field (<1.8 T), which is assumed to be due to Fe at an interstitial site.

(CBPF/CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO MAGNÉTICA DE MULTICAMADAS CoFe/Cu ELETRODEPOSITADAS

R. C. da Silva, E. M. Kakuno, D. H. Mosca

Laboratório de Materiais, Departamento de Física - UFPR  
81531-990 Curitiba Paraná

**palavras-chave:** multicamadas magnéticas, eletrodeposição, magnetoresistência

Neste trabalho é apresentada a caracterização magnética de multicamadas CoFe/Cu eletrodepositadas através de medidas das curvas de magnetização versus campo magnético e medidas de magnetoresistência. O objetivo aqui é verificar que amostras produzidas por deposição eletroquímica, que se constitui em uma técnica experimental simples e de baixo custo, podem ser utilizadas para a elaboração de elementos sensores magnetoresistivos. Multicamadas CoFe/Cu são preparadas pela técnica potenciostática pulsada a partir de uma única solução eletroquímica supersaturada com os metais Co e Fe e reduzida concentração de Cu. O período de modulação química das multicamadas varia entre 3 e 10 nm, sendo a espessura das camadas CoFe fixa em 2 nm. Texturização na direção preferencial (111) é obtida através de filmes finos de Cu altamente texturizados previamente depositados sobre substratos de Si monocristalinos. A caracterização estrutural e química das amostras é apresentada em outro trabalho neste mesmo encontro. A caracterização magnética das amostras é feita através de um magnetômetro de força gradiente alternante recentemente construído no laboratório. Medidas de magnetização versus campo magnético de até 7 kOe são realizadas à temperatura ambiente com aquisição dados experimentais feita através de um amplificador síncrono (lock-in) automatizada via interface GPIB. Medidas de magnetoresistência utilizando a técnica padrão de quatro terminais com corrente alternada são realizadas também a temperatura ambiente na geometria com o campo magnético paralelo à corrente elétrica. Essas amostras de simples preparo e baixo custo de produção apresentam magnetoresistência elevada demonstrando um grande potencial para aplicação na área de sensores magnetoresistivos.

(CNPq, FUNPAR, PADCT)

## MAGNETIC COUPLING NEAR METALLIC SURFACES

*Augusto César de Castro Barbosa<sup>1</sup>, Marcus Vinicius Tovar Costa<sup>2</sup> e José d'Albuquerque e Castro<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (UFF),  
Niterói, RJ, 24.210-340

<sup>2</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro, 22290-180, RJ, Brazil

**Key words:** metallic magnetism, exchange coupling, stiffness constants.

The exchange coupling between local magnetic moments in metallic systems is investigated as function of the band filling and magnitude of the exchange splitting in the material. The strength of the coupling is estimated from the change in the thermodynamical potential due to a small rotation of the local moment on a given site with respect to the direction of the bulk magnetization. The approach is based on an extension of the theory developed for studying the exchange coupling in metallic multilayers<sup>1</sup>. Calculations are performed for moments both at the surface and in the bulk, and the corresponding values of the local stiffness constant<sup>1</sup>  $D_{\text{ra}}$  are compared. Results indicate that the coupling near the surface can be significantly different from that in the bulk. The stiffness  $D_{\text{ra}}$  gives also the stability of the ferromagnetic state with respect to local spin fluctuations, which is shown to depend on both the band filling and exchange splitting. We also investigated the coupling between one magnetic atomic layer and a ferromagnet substrate separated by layers of a non-magnetic material. We find that, depending on the thickness of the non-magnetic layer, the coupling between the magnetic monolayer and the substrate can be either ferro- or antiferromagnetic.

<sup>1</sup>J. d'Albuquerque e Castro, M. S. Ferreira and R. B. Muniz, Phys. Rev. B 49, R16062 (1994).

(CNPq, Finep)

## THE THERMOELECTRIC POWER OF CoCu HETEROGENEOUS RIBBONS

*Arlei Borba Antunes<sup>1</sup>, Marcelo Knobel<sup>2</sup>, Mario Norberto Baibich<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil

<sup>2</sup>Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

**Palavras-Chave:** thermopower, heterogeneous alloys, annealing

The granular ribbons of composition  $\text{Co}_{10}\text{Cu}_{90}$  show giant magnetoresistance when properly heat treated, and this has attracted much attention to its magnetic and transport properties. One of the important quantities to be understood in these systems is the thermoelectric power (or better still, the magneto thermopower) that relates, in a granular media such as this, to the size and average distance of the granules, as well as their shape. In this particular case, since one is dealing with a product of chemical segregation, nearly spherical Co precipitates are expected (and confirmed by several authors through electronic microscopy). The transport properties of such a system can be described in terms of a standard composite (Landauer) description. Since the conductivity of both constituents is of the same order of magnitude, a simplified formulation can be used, allowing an interpretation of the transport as a combination of CPP (current perpendicular to plane) and CIP (current in plane) conduction. We have measured the thermoelectric power of these alloy (and the magneto thermopower) at different stages of the annealing process, as well as one "flash annealed" (Joule self heated) sample as a function of temperature, at low temperatures, using an integral method. Since the temperatures in flash annealing cannot be directly determined, an equivalent temperature was established on the basis of each sample's magnetic behavior. The experimental results show clearly that the thermoelectric power is indeed highly dependent of the size and average distance between the precipitates, as predicted in the theoretical models, being a good parameter for the evolution of the induced transformations.

(CNPq, FINEP, PADCT)

## FMR IN Co(100) THIN FILMS ON MgO

*Victor C. Santos and Antonio A. R. Fernandes*

Instituto Militar de Engenharia - RJ

*Carlos A. Ramos*

Centro Atômico Bariloche - Argentina

*Eric E. Fullerton*

Argonne National Laboratory - U.S.A.

**Palavras-Chave:** filmes magnéticos, ressonância ferromagnética, anisotropia magnética

In recent years much attention has been given to ferromagnetic thin films, specially multilayer films for magnetic sensor applications. Thin films based on ferromagnetic materials have shown large magnetoresistance and high saturation magnetization. Among the properties of ferromagnetic thin films, magnetic anisotropy is one of the most extensively investigated. The ferromagnetic resonance (FMR) technique has been widely used to measure film magnetic parameters, magnetic anisotropy among them. In this work we report the results of FMR measurements (X-band) on fcc Co(100) single layer films at room temperature. The Co films were prepared using RF sputtering system. The 500Å films were grown on MgO(100) substrates. The analysis of the resonance relationship for single-crystal films was performed using the energy method. From the angular dependence of the resonance field in a plane perpendicular to the plane film the effective anisotropy field  $H_{EF}$  was evaluated to be  $4596 \pm 16$  G. Using the  $4\pi M$  value of bulk cobalt at room temperature (17.6 kG), the anisotropy field  $H_A$  was found to be equal to 13.00 kG. The values of  $H_{EF}$  and  $H_A$  are compared to bulk values in table I.

T (K)	Samples	$H_{EF} = 4\pi M - H_A$ (kG)	$H_A$ (kG)
291	bulk	7.04	10.56
300	500 Å	4.60	13.00

From the dependence of the resonance field on the angle  $\theta_H$  the results are consistent with the assumed [100] orientation of the Co film, where the resonance field has to overcome the maximum effects of the perpendicular uniaxial anisotropy. No absorption was observed in the case of in-plane measurements.

(CNPq, FAPERJ)

## GMR E INTERAÇÕES MAGNÉTICAS EM Co<sub>10</sub>Cu<sub>90</sub> GRANULAR EM FUNÇÃO DA TEMPERATURA DE TRATAMENTO TÉRMICO

*Alexandre Da Cas Viegas, Julian Penkov Geshev, Lucio Strazzabosco Dorneles,*

*Marcelo Knobel\* e João Edgar Schmidt*

Laboratório de Magnetismo, Instituto de Física, UFRGS - Porto Alegre, RS

\*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Campinas, SP

**Palavras-chave:** Co-Cu granular, magneto-resistência gigante, interações magnéticas

São apresentados resultados referentes ao estudo de sistemas CoCu granulares produzidos por "melt-spun" na forma de fitas. Este sistema tem sido amplamente estudado por apresentar magneto-resistência gigante (GMR), que é maximizado pela presença de alinhamento aleatório dos momentos magnéticos na ausência de campo magnético externo, de acordo com as teorias de espalhamento dependente de spin. Relacionamos a amplitude das curvas de  $\delta M$  (que mostra o grau de interação entre partículas) construídas através das curvas de remanência com a amplitude da magneto-resistência ( $\Delta R/R$ ) procurando possível correlação entre elas. As amostras compostas de Co<sub>10</sub>Cu<sub>90</sub> foram submetidas a diversos tratamentos térmicos até 700 °C por uma hora. As curvas de remanência e magnetização foram obtidas num magnetômetro de gradiente alternado (AGM). As medidas de  $\Delta R/R$  foram obtidas pelo método de quatro pontas. São obtidas as dependências de  $\Delta R/R$ ,  $\delta M$ , campo coercivo ( $H_c$ ) e campo coercivo da remanência ( $H_r$ ) em função da temperatura de tratamento. Da mesma forma são obtidas as dependências da magnetização de saturação ( $M_s$ ) e tamanho de grãos utilizando um método numérico supondo que o sistema é formado por partículas super-paramagnéticas e partículas ferromagnéticas (mono- e multi- domínios). As curvas de  $M_s$ ,  $H_c$  e  $\Delta R/R$  mostram um comportamento similar ao encontrado em outros trabalhos no mesmo sistema. Os valores de  $M_r/M_s$  mostram um mínimo no mesmo ponto onde  $\Delta R/R$  é máximo, indicando o maior grau de acoplamento anti-ferromagnético.  $\delta M$  mostra que as interações que dominam são negativas e o máximo é em temperaturas acima do máximo em  $\Delta R/R$ . Em temperaturas entre 450°C e 600°C,  $\delta M$  e  $H_r$  têm comportamentos inversos indicando que nesta faixa o comportamento do sistema é dominado pela variação na interação entre partículas.

(CNPq, FAPERGS, FINEP)

## ESPALHAMENTO DE LUZ BRILLOUIN E FMR EM Fe/Cr/Fe CRESCIDO POR MBE

*Sergio Rezende, Flavio de Aguiar, Antonio Azevedo, Marcos Lucena e Carlos Chesman*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil

e

*Pavel Kabos e Carl Patton*

Department of Physics, Colorado State University, Ft. Collins, CO 80523, USA

**Palavras-Chave:** filmes finos metálicos magnéticos, ondas de spin

As técnicas de espalhamento de luz Brillouin e de ressonância ferromagnética (FMR) foram utilizadas para estudar excitações magnéticas em um sanduiche de filmes finos epitaxiais de (100) Fe(38 Å)/Cr(13 Å)/Fe (38 Å) em temperatura ambiente. A amostra foi crescida por MBE em um "buffer" de ZnSe de 2000 Å de espessura, depositado em um substrato de (100) GaAs. Nosso espectrômetro de BLS faz uso de um laser de Ar<sup>+</sup> (P ~ 70 mW,  $\lambda = 5145$  Å); a luz espalhada é colimada e direcionada a um interferômetro Fabry-Perot de seis passagens de última geração e detectada por um dispositivo de estado sólido de baixo ruído acoplado a uma placa multicanal instalada em computador. Com essa técnica, medimos relações de dispersão do tipo "frequência vs campo aplicado" e "frequência vs vetor de onda" para diferentes direções do campo, aplicado no plano da amostra. A FMR (9.5 GHz) faz uso de um espectrômetro montado no DF-UFPE. Nesse caso, foram feitas medidas sistemáticas do campo de ressonância em função da direção do campo em relação aos eixos cristalinos no plano da amostra. O acoplamento antiferromagnético entre as magnetizações nos dois filmes de Fe, juntamente com a pequena anisotropia uniaxial no plano da amostra, somada à anisotropia cúbica, resultam em espectros complexos e num rico diagrama de fase para as excitações. A observação de ambos modos acústico e óptico com as duas técnicas permite a determinação de um conjunto preciso de valores para os vários parâmetros da amostra, a partir de ajustes teóricos aos dados experimentais.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE (UFPE)) e (NSF, ONR, ARO (CSU))

## ESTUDO DE MULTICAMADAS METÁLICAS DE Fe E Cr NA DIREÇÃO (100)

*A. B. Klautau<sup>1</sup>, S. Frota-Pessôa<sup>1</sup> e R.B. Muniz<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Instituto de Física da USP (IFUSP), <sup>2</sup> Universidade Federal Fluminense(UFF)

**Palavras-Chave:** multicamadas metálicas, estrutura eletrônica, momento magnético

Recentemente desenvolvemos um esquema do método RS-LMTO-ASA [1] ("Real Space - Linear Muffin-Tin Orbitals - Atomic Sphere Approximation") para tratar sistemas bidimensionais[2]. Neste trabalho temos uma primeira aplicação dos códigos para tratar multicamadas magnéticas. Apresentamos resultados de primeiros princípios obtidos com este método para multicamadas metálicas de Fe e Cr na direção (100), com a motivação de entender o curioso comportamento observado experimentalmente para camadas de Cr em Fe bcc. O estado fundamental magnético do Cr puro bcc é uma onda de densidade de spin não comensurável com a rede cristalina (quase um antiferromagneto) com momento magnético local aproximadamente igual a  $0.6\mu_B$ [3]. Foi também observado que camadas finas de Cr sobre Fe(100) [4] possuem momento magnético local bastante significativo. No entanto, recentemente, foi observado [5] que camadas de Cr, com espessura menor que aproximadamente 30 planos atômicos, justapostas entre camadas de Fe (100), são paramagnéticas ou não magnéticas mesmo a baixas temperaturas. Nossos resultados mostram que esse momento não desaparece devido a interação do momento do Cr com o momento do Fe. Ao contrário, calculamos que após umas duas camadas o comportamento do Cr é semelhante ao "bulk". Cálculos teóricos e medidas de Cr sob pressão indicam que o antiferromagnetismo do Cr é bastante sensível a pequenas variações do parâmetro de rede. Nossos resultados mostram que uma pequena compressão da rede do Cr devido a presença das camadas de Fe podem provocar o desaparecimento do momento magnético local no Cr.

1. P.R. Peduto, S. Frota-Pessôa, M. Methfessel - Phys. Rev. B 44, 13282(1991).
2. P.R. Peduto - Tese de Doutorado - IFUSP(1995).
3. G. Shirane and W.J. Takei - J.Phys.Soc.Japan Suppl.17,BIII,35(1962).
4. C. Turtur and G. Bayreuther - Phys.Rev.Lett. 72, 1557(1994).
5. J.Meerschaut, et al. - Phys.Rev.Lett. 75, 1638(1995).

## ANÁLISE ESTRUTURAL E QUÍMICA DE MULTICAMADAS CoFe/Cu ELETRODEPOSITADAS

E. M. Kakuno, N. Mattoso, W. H. Schreiner, D. H. Mosca, M. A. B. Gomes\*, S. R. Teixeira\*\*

Laboratório de Materiais, Departamento de Física - UFPR, 81531-990 Curitiba Paraná

\*Laboratório de Eletroquímica, Departamento de Química - UFPR, 81531-990 Curitiba Paraná

\*\*Laboratório de Filmes Finos, Instituto de Física - UFRGS, 91501-970 Porto Alegre RS

*Palavras-Chave:* multicamadas magnéticas, eletrodeposição, sistema Co-Fe

Neste trabalho é apresentada a técnica potenciostática pulsada utilizada para a eletrodeposição de multicamadas CoFe/Cu a partir de uma única solução eletrolítica supersaturada com os metais Co e Fe e apresentada a análise estrutural e química das amostras. As multicamadas eletrodepositadas são compostas por camadas de ligas CoFe espaçadas por camadas de Cu. A deposição, o controle da espessura e do número de períodos de repetição das camadas é feito através de pulsos de sobrepotencial aplicados a solução por intermédio de um potenciostato (EG&G 273A) controlado por um software dedicado. Uma interface de comunicação rápida (200 kHz) permite a monitoração das espessuras através do controle dos sobrepotenciais aplicados, em relação a um eletrodo de referência Ag/AgCl, sobre o eletrodo de trabalho. A escolha dos valores dos sobrepotenciais e do pH da solução no diagrama de Pourbaix são cruciais para evitar a incorporação de bolhas de hidrogênio nas amostras. Substratos de Si monocristalinos, previamente recobertos por filmes finos de Cu altamente texturizados, são utilizados como suporte das amostras para induzir a texturização preferencial ao longo da direção  $\langle 111 \rangle$ . O período de modulação química das multicamadas eletrodepositadas é determinado por medidas de difração de raios-X na geometria Bragg-Brentano, através do posicionamento das reflexões satélites associadas à modulação química. O período de modulação química varia entre 3 e 10 nm, sendo a espessura das camadas CoFe fixa em 2 nm. Microscopia eletrônica de varredura é utilizada para a caracterização do estado metalúrgico das amostras. A análise da composição química é feita por microscopia eletrônica com EDS e fluorescência de raios-X.

(CNPq, FUNPAR, PADCT)

## ANISOTROPIA MAGNÉTICA E ACOPLAMENTO ENTRE CAMADAS EM MULTICAMADAS DE Co/Pd

J.A. Romano<sup>1</sup>, E.C. da Silva<sup>1</sup>, L.F. Shelp<sup>2</sup>, J.E. Schmidt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Cx.P. 6165, 13083-970 Campinas (SP), Brasil.

<sup>2</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS Cx. P. 15051, 91 501-970 Porto Alegre (RS), Brasil

*Palavras-Chave:* multicamadas, ressonância ferromagnética, anisotropia magnética

Grande atenção tem sido despertada por sistemas multicamadas de Co/Pd por ser este um forte candidato como meio magnético de gravação de alta densidade. Estes sistemas, em alguns casos, apresentam eixo fácil de magnetização perpendicular ao plano do filme. Neste trabalho estudamos um filme de Co/Pd (4.25/15 Å), depositado em substrato de Si (111), policristalino com texturização na direção (111). A amostra foi preparada pelo grupo de Física da UFRGS e já caracterizada por outras técnicas. Aqui apresentamos resultados obtidos com FMR e efeito Kerr, que indicaram um eixo fácil para a magnetização perpendicular ao plano do filme, como já era de se esperar para esta espessura de Co de acordo com a literatura. As medidas de FMR foram feitas em função do ângulo do campo externo em relação ao plano do filme a fim de determinarmos sua constante de anisotropia. Convém dizer que medidas de FMR em sistemas com tal ordem de grandeza de espessura são difíceis de serem realizadas e interpretadas. As medidas de efeito Kerr foram feitas na configuração polar e longitudinal. Observamos um comportamento atípico da ressonância a qual só é detectada quando decrescemos o campo magnético a partir de um determinado patamar. Estes resultados associados aqueles obtidos por efeito Kerr podem estar indicando um possível acoplamento antiferromagnético entre as camadas de Co na ausência de campo externo, ou mesmo para campos pequenos.

## DIFUSÃO DE TÂNTALO EM FILMES FINOS DE NIQUEL

*Manfredo H. Tabacniks<sup>1</sup>, John E.E. Baglin<sup>2</sup> e Andrew J. Kellock<sup>2</sup>.*

1) Instituto de Física - USP, 2) IBM Almaden Research Center, CA, EUA

*Palavras-Chave:* difusão, níquel, tântalo

Filmes de tântalo são usados como camada protetora contra oxidação e "seed layer" de filmes de permalloy ( $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ ), em dispositivos de leitura/gravação magnética. Com a contínua redução das dimensões físicas destes dispositivos, efeitos de difusão e interação entre camadas nas temperaturas de processamento e de serviço podem influir no desempenho do dispositivo. Pesquisa bibliográfica revelou poucos dados sobre a cinética de interação Ni/Ta e menos ainda na forma de filmes finos. A metodologia utilizada foi o crescimento de filmes finos policristalinos ( $\sim 1000\text{\AA}$ ) multicamada de Ni/Ta e Ta/Ni/Ta sobre substratos de quartzo ou  $\text{Al}_2\text{O}_3$  monocristalino, com tamanho de grão controlado. Os filmes foram recozidos por 0,3, 1, 3, 9 e 27 horas, em temperaturas de 250, 300, 350 e 400°C para acelerar os processos de difusão e obter a energia de ativação. A análise dos filmes foi feita por RBS convencional com correntes de feixe muito baixas para que os eventos de empilhamento sejam reduzidos ao mínimo possível.

Em temperaturas abaixo de 350°C, não se observou transporte de Ni em Ta. A difusão de Ta em filmes finos de níquel, é aparentemente controlada por borda de grão com energia de ativação entre 0,5 e 0,6 eV. A dependência temporal com  $t^{1/3}$ , denominada difusão assistida por borda de grão, confirma o resultado anterior. Todavia, a concentração média de Ta encontrada no filme de níquel foi muito baixa, muito menor que o volume médio de borda de grão estimado, qualquer que seja o modelo adotado. A hipótese a ser verificada é a existência de canais de difusão possivelmente localizados em bordas de grão em ângulo, mais raros, porém com grande capacidade de carga. (FAPESP)

## INFLUÊNCIA DO TEMPO DE TRATAMENTO TÉRMICO NA GMR E NAS INTERAÇÕES MAGNÉTICAS EM LIGAS DE $\text{Co}_{10}\text{Cu}_{90}$ "MELT-SPUN"

*Lucio Strazzabosco Dorneles, Alexandre Da Cas Viegas, Julian Penkov Geshev, Marcelo Knobel\* e João Edgar Schmidt*

Laboratório de Magnetismo, Instituto de Física, UFRGS - Porto Alegre, RS

\*Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, Campinas, SP

*Palavras-chave:* Co-Cu granular, magneto-resistência gigante, interações magnéticas

São apresentados resultados referentes ao estudo de sistemas cobalto(10%)/cobre(90%) granulares produzidos por "melt-spun" na forma de fitas. Nos últimos quatro anos sistemas baseados em aglomerados ferromagnéticos dispersos numa matriz não magnética receberam grande interesse por apresentar magneto-resistência gigante (GMR). É aceito que a GMR neste sistema é fortemente influenciada pela distribuição de tamanho e distância entre partículas, o que pode condicionar uma configuração inicial de momentos magnéticos aleatória que maximiza o efeito. As amostras foram submetidas a tratamentos térmicos de até quatro horas a 450°C. As curvas de remanência e magnetização foram obtidas utilizando um magnetômetro de gradiente alternado (AGM). As curvas de  $M_r(H=0)/M_s$  e  $\Delta R/R(H=0)$  mostram comportamentos inversos, seguindo as variações das interações antiferromagnéticas em função do tempo de tratamento. Foram estudados também os efeitos das interações magnéticas usando outros dois métodos independentes: a técnica de  $\delta M$  e o desvio do comportamento quadrático de  $\Delta R/R$  em função da magnetização. A amplitude (negativa) das curvas de  $\delta M(H=H_c)$ , onde  $H_c$  é o campo coercivo da curva de remanência, está relacionada com as interações ferromagnéticas, enquanto que o desvio do comportamento quadrático no mesmo campo está relacionado com as interações antiferromagnéticas, responsável pela magneto-resistência gigante. Foi observado que tempos de tratamento até 120 min provocam um aumento de ambos os tipos de interações: ferro- e antiferro- magnéticas. Para tempos maiores de tratamento é observada uma diminuição dos efeitos das interações provavelmente provocada pela diminuição no valor de  $M_s$ . O tamanho dos grãos superparamagnéticos diminui rapidamente até 30 min de tratamento chegando à saturação.

(CNPq, FAPERGS, FINEP)

## ANISOTROPY EFFECTS IN DOMAIN WALL PINNING AT F/AF INTERFACES

*Ana L. Dantas and A. S. Carriço*

Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, UFRN  
Campus Universitário, 59072-970 Natal-RN

*Palavras-Chaves:* anisotropy, interface, Néel walls

The existence of interface roughness has frequently been invoked to explain special features introduced by the coupling across the interface between a ferromagnetic film and an antiferromagnet. Two such situations are noteworthy: the biquadratic coupling between ferromagnetic films separated by an antiferromagnet in a trilayer and the interface exchange bias responsible for the hysteresis shift of ferromagnetic films on antiferromagnetic substrates. In both cases the effect is related to interface roughness. The nucleation and stability of nonuniform magnetization structures near the interface is of particular interest. The formation of domain walls in either the antiferromagnet or ferromagnet is now accepted as the mechanism to explain the correct order of magnitude of the interface exchange bias. We present a study of ferromagnetic domain wall nucleation and saturation field near F/AF interface defects that produce sudden changes in the sign of the coupling. For thin ferromagnetic films, Néel walls are energetically favorable and the magnetization is supposed uniform in the direction perpendicular to the interface. Equilibrium states are found for the ferromagnetic film subjected to a step discontinuity of the interface coupling. In our model this consists of an extra source of local field for the ferromagnetic spins since the AF is considered frozen in the antiferromagnetic state. Both uniaxial and cubic anisotropies are considered for the ferromagnet. We find that the domain wall nucleation and pinning require stronger exchange coupling for uniaxial anisotropy. Also the sequence of steps towards saturation, by application of an external field, is different in these two cases. For the uniaxial ferromagnet the domain wall deforms progressively towards saturation. In the cubic anisotropy case, if the interface coupling is strong, the low field 180° wall deforms in a mixed state which contains 90° walls. In both cases we find that 360° walls form in large applied fields and saturates very slowly.

## DEPENDÊNCIA COM A TEMPERATURA DO ACOPLAMENTO BIQUADRÁTICO EM Fe/Cr/Fe USANDO RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA

*Carlos Chesman, Antonio Azevedo, Sergio Rezende e Flavio de Aguiar*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil

and

*X. Bian and Stuart Parkin*

IBM Almaden Research Center, 650 Harry Road, San Jose, CA 95120, USA

*Palavras-chave:* Filmes finos magnéticos, Ressonância ferromagnética.

Usamos a técnica de ressonância ferromagnética (FMR) para investigar a dependência com a temperatura dos acoplamentos bilinear e biquadrático entre as camadas de Fe da tracamada Fe/Cr/Fe. Uma série de 16 amostras com a composição Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å) foi crescida por 'sputtering' de vácuo ultra alto sobre substratos de MgO(100) com a espessura do cromo (t) variando de 5Å a 35Å. Pronunciado acoplamento biquadrático foi observado na amostra com t=15Å, que corresponde a uma região onde o acoplamento bilinear é fraco. O acoplamento biquadrático foi bem caracterizado à temperatura ambiente usando-se as técnicas de efeito Kerr magneto-óptico (MOKE), magneto-resistência (MR), ressonância ferromagnética (FMR) e espalhamento de luz Brillouin (BLS). Neste trabalho estudamos a dependência do acoplamento biquadrático da amostra com t=15Å, em função da temperatura, usando-se FMR. As medidas foram realizadas na banda-X (9.4 GHz) utilizando-se um espectrômetro fabricado no DF-UFPE. O intervalo de temperaturas estudado foi de 10K a 300K. A dependência angular dos campos de ressonância (modos acústico e óptico) é fortemente influenciada pela variação do acoplamento biquadrático e bilinear com a temperatura. O campo de ressonância foi calculado através da linearização da equação de movimento de Landau-Lifshitz. Através do melhor ajuste numérico para os dados experimentais, determinamos os valores dos acoplamentos bilinear e biquadrático com a temperatura. Resultados preliminares mostram que na temperatura mais baixa o acoplamento bilinear é cerca de 20% maior do que em temperatura ambiente (300 K) enquanto que o biquadrático dobra seu valor.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE, Office of Naval Research (IBM))

## Um Refrigerador de Diluição de Plástico em ímã de 35 T

Nei F. Oliveira, Jr.<sup>a</sup>, Valdir Bindilatti<sup>a</sup>, Ewout ter Haar<sup>a</sup>, Ramon V. Martin<sup>a</sup> and Edward J. McNiff Jr.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Universidade de S. Paulo, C.P. 66318, CEP 05389-970, S. Paulo, SP, Brasil

<sup>b</sup> FBNML-MIT, 170 Albany St., Cambridge, MA 02139, USA

Construímos um Refrigerador de Diluição totalmente em material plástico, suficientemente pequeno para poder ser colocado inteiramente dentro do "bore" do ímã híbrido de 35 T do MIT. O aparelho foi montado dentro de um tubo de 15 mm de diâmetro e 450 mm de comprimento. A temperatura de base a campo nulo foi de 20 mK, medida com um termômetro de Nitrato de Cério e Magnésio. Foi-nos possível testar duas vezes o refrigerador com o ímã. Na presença do campo, usamos termômetros capacitivos de vidro, e resistências Matsushitas. Todos os dados obtidos nas duas corridas são consistentes com um termômetro de vidro independente do campo até 35 T (como era de se esperar), e uma magnetoresistência das Matsushitas certamente menor que 2 mK a campos altos. A menor temperatura medida a 35 T foi de  $25 \pm 1$  mK. O efeito das vibrações do ímã (o dewar do refrigerador estava apoiado diretamente em cima da estrutura do magneto), bem como o efeito de varreduras de campo de até 1 T/min. causaram aquecimentos menores do que 3 mK, equivalentes a uma potência menor do que  $1 \mu\text{W}$ . Um efeito curioso foi observado acima de 29 T: os gradientes de temperatura normalmente existentes na Câmara de Mistura (um espaço cilíndrico de 11 mm de diâmetro por 65 mm de altura) de repente desapareceram, ficando a câmara a uma temperatura homogênea de cima a baixo. Aparentemente, sob a ação das forças magnéticas, a mistura rica em  $^3\text{He}$  não mais flutua sobre o  $^4\text{He}$ , mas difunde em gotículas por toda a câmara. Durante os dois testes realizamos também três experiências simultâneas de magnetoresistência, em dois semicondutores e um supercondutor.

## DIAGRAMA DE FASE DE MULTICAMADAS MAGNÉTICA

*T. L. Fonseca e N. S. Almeida*

Departamento de Física teórica e Experimental, UFRN  
59072-970 - Natal, RN

*Palavras-Chave:* diagrama de fase, interação biquadrada, histerese

Quando filmes ferromagnéticos são incorporados em multicamadas magnéticas ou superredes, o acoplamento entre os filmes adjacentes é mediado pela geometria e propriedades físicas do meio que os separa (espaçador). Para muito dos sistemas estudados até o presente, este acoplamento tem o caráter da interação de troca de Heisenberg e, conseqüentemente, pode ser escrita na forma  $H_e \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2$  (acoplamento bilinear) sendo  $\mathbf{n}_1$  e  $\mathbf{n}_2$  vetores unitários paralelos a magnetização dos filmes apropriados, e  $H_e$  a diferença de energia entre configurações com as magnetizações dos filmes adjacentes alinhadas paralela ou antiparalelamente. É também conhecido que  $H_e$  pode assumir valores positivos (acoplamento antiferromagnético) ou negativo (acoplamento ferromagnético) dependendo da espessura do espaçador. Recentemente foi observado que o acoplamento interfilmes pode ser mais complexo do que o descrito acima. Em amostras onde a espessura do espaçador é na vizinhança do valor onde  $H_e$  troca de sinal, configurações onde os momentos magnéticos dos filmes adjacentes formam um ângulo de  $90^\circ$  foi observado. Este comportamento levou ao entendimento que, em adição ao acoplamento descrito acima, um acoplamento da forma  $H_b(\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)^2$ ,  $H_b > 0$ , (acoplamento biquadrado) deveria estar presente. Neste trabalho apresentamos o diagrama de fase de dupla camadas fabricadas com filmes ferromagnéticos onde o acoplamento entre eles é mediado por um meio não magnético. Supomos que a interação entre os filmes contém componente biquadrada além da componente bilinear e da anisotropia cristalina. Nossa análise mostra um diagrama de fase onde, para valores convenientes dos parâmetros que descrevem as interações, o sistema apresenta até quatro fases estáveis. Assumindo que o sistema "escolhe" a configuração de mais baixa energia, apresentamos as curvas de magnetização vs campo aplicado e as relações de dispersão para os modos acústico e ópticos do sistema. Os resultados teóricos estão de acordo com recentes resultados experimentais.

(Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq)

## INVESTIGAÇÃO DOS ACOPLAMENTOS BILINEAR E BIQUADRÁTICO POR FMR NA SÉRIE Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å)

*Carlos Chesman, Sergio Rezende, Antonio Azevedo e Flavio de Aguiar*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife, Brasil

e

*X. Bian e Stuart Parkin*

IBM, Almaden Research Center, San Jose, CA-USA

**Palavras-chave:** Filmes finos magnéticos, Acoplamento magnético, Ressonância ferromagnética

Neste trabalho utilizamos a técnica de ressonância ferromagnética (FMR) para investigar o acoplamento magnético em tricamadas Fe(40Å)/Cr(t)/Fe(40Å). Foi investigada uma série de 16 amostras nas quais a espessura da camada de cromo varia de 5Å a 35Å. Este intervalo corresponde aos dois primeiros picos do acoplamento antiferromagnético entre as camadas de ferro. As amostras foram depositadas por "sputtering" de vácuo ultra alto sobre substratos de MgO(100). As medidas de FMR foram realizadas em 9,4 GHz e 12,1 GHz com o campo magnético aplicado no plano do filme. A dependência angular dos campos de ressonância dos modos acústico e óptico é fortemente influenciada pelo tipo de acoplamento. Nas amostras ferromagneticamente acopladas apenas o modo acústico é detetado nessas frequências, enquanto que nas amostras com acoplamento antiferromagnético os dois modos são detetados. As amostras com acoplamento antiferromagnético fraco apresentam um forte acoplamento não-Heisenberg (biquadrático) que se caracteriza pelo alinhamento perpendicular entre as magnetizações dos dois filmes de ferro. Os modos ópticos e acústico são os modos normais calculados a partir da equação linearizada de Landau-Lifshitz, supondo pequenos desvios da magnetização em relação às posições de equilíbrio. Com ajustes numéricos aos dados experimentais, determinamos os valores dos seguintes parâmetros: magnetização de saturação, anisotropia cristalina, acoplamentos bilinear e biquadrático.

(CNPq, CAPES, PADCT, FINEP, FACEPE, Office of Naval Research (IBM))

## CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS MAGNÉTICOS EVAPORADOS POR SPUTTERING

*J. D. Ardisson<sup>1</sup>, M. D. Martins<sup>1</sup>, A. I. C. Persiano<sup>2</sup>, V. E. de Carvalho<sup>2</sup>, W. A. A. Macedo<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear, Belo Horizonte, MG

<sup>2</sup>Universidade Federal de Minas Gerais

**Palavras-chave:** filmes finos, compostos Fe-Co e Pr<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>

Investigamos as propriedades magnéticas e estruturais de filmes finos de Fe-Co e Pr<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub> com diferentes graus de fluoretação, em extensão ao estudo que vimos realizando sobre as propriedades magnéticas no volume, desses compostos. O material foi evaporado por sputtering sob fluxo de Ar ultrapuro e depositando sobre lâminas de quartzo, tendo como alvo ligas básicas daqueles dois sistemas magnéticos. Após a deposição das ligas Pr<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>, as mesmas foram submetidas ao processo de adição gasosa de flúor visando o estudo da evolução de suas propriedades magnéticas e estrutural (expansão da rede) e estabilização da fase quanto ao bloqueio do processo de oxidação do filme quando exposto à atmosfera. A formação de estruturas com diversos graus de ordenamento no sistema Fe-Co é também investigada. As amostras foram caracterizadas através das técnicas de difratometria de raios-X e espectroscopias Auger e Mössbauer (CEMS). Os resultados Auger mostram a presença dos componentes das ligas. No caso da liga Pr<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>, constatou-se a presença de oxigênio indicando a necessidade da deposição e análise in situ. O mesmo não foi observado para as amostras do sistema Fe-Co que apresentam alta estabilidade à oxidação. Após a adição de flúor, as amostras do segundo sistema apresentaram melhorias no comportamento magnético com aumento do campo hiperfino, havendo indicações de estabilização da estrutura quanto ao processo de oxidação. O espectro Mössbauer das amostras Pr<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub> apresentou um dubleto típico da fase no estado paramagnético, evoluindo para um estado ferromagnético após a adição de flúor. As amostras FeCo apresentaram uma distribuição de campos hiperfinos característica de estados variados de ordem de curto alcance.

(FAPEMIG, CNPq, Finep)

## CARACTERIZAÇÃO DE COMPÓSITOS PREPARADOS PELO PROCESSO SOL-GEL ATRAVÉS DE ESPECTROSCOPIA DE VIDA MÉDIA DE PÓSITRON

*Edésia M. B. De Souza\**, *Wellington F. de Magalhães* e *Nelcy D. S. Mohallem.*  
(\*CDTN e Departamento de Química da UFMG)

**Palavras-chave:** processo sol-gel, compósitos de sílica e aniquilação de pósitrons

Matrizes de SiO<sub>2</sub> foram preparadas pelo processo sol-gel, usando-se TEOS, etanol e água na razão molar 1/3/10 e ácidos clorídrico e fluorídrico como catalizadores. Estas matrizes foram dopadas com cobre através da adição de CuCl e CuSO<sub>4</sub> e com titânio através da adição de isopropóxido de titânio à matriz, durante a preparação do sol mantido sob agitação.

As amostras foram preparadas na forma monolítica, foram secas a 110°C durante 24 horas e tratadas termicamente por duas horas nas temperaturas de 500, 700, 900 e 1100°C. A evolução estrutural destas amostras foram estudadas através de técnicas convencionais como Difração de Raios X, Porosimetria de Mercúrio, BET, DTA/TG e Picnometria. Utilizamos também a técnica de Espectroscopia de Vida Média de Pósitrons, que tem sido recentemente utilizada como sonda microscópica em estudos preliminares para a determinação de volume livre em vários tipos de materiais como zeólitos, polímeros e ligas metálicas.

Todas as amostras apresentam uma estrutura de poros estável, com raios da ordem de 13Å até 900°C, a partir de onde inicia-se o processo de densificação, com uma redução drástica do tamanho dos poros.

(CNPq, Fapemig, PRPq)

## ABSORPTION IN THE MODEL OF SELF-CONSISTENT X-RAY SCATTERING

*Włodzimierz Keller* and *Dionis Carlos Soares de Vasconcelos*  
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

**Palavras-Chave:** absorption, self-consistency, scattering

Absorption is approached as a local and statistical event in contrast with a background of the global and strictly determined pattern of x-ray crystal scattering. While particular and detailed physical mechanism of the absorption phenomenon is here considered irrelevant, the main concern is given to the overall effects of absorption on the earlier developed self-consistent model of x-ray scattering. The above model substitutes a single dipole, used originally in Ewald's taking advantage of the self-consistency principle as determining the scattering mode. The following points, diverging with the previous work, are:

- i) Absorption takes place exclusively at the electron sites arranged in a set of dipoles planes.
- ii) The flux of photons incident on each dipole plane is divided into two branches. The first one, as suffering unknown a priori frequency changes, is considered redundant for the model. The second branch is that of the unchanged wavelength. It is scattered under exact satisfaction of the Ewald self-consistency principle and gives rise to the overall scattering pattern of a crystal. The latter, for a non-absorbing case, can guarantee energy conservation for each dipole plane and for the model as whole.
- iii) Absorption is considered as a localized occurrence, with a probability factor which can be proportional to the first or higher powers of intensity of the resulting stationary and local electric field (two-photon absorption in a case of very strong fields).
- iv) The latter is calculated separately for both polarization states, which for an non-absorbing crystal are quite independent of each other. the absorption is thus a unique link which interlaces these two states in the absorption effect. The calculated absorption profiles reproduce the experimental results.

## CÁLCULO DAS PROPRIEDADES DINÂMICAS DE CRISTAIS ANARMÔNICOS USANDO A LINGUAGEM MAPLE

*Sauli dos Santos Junior, Renato de Almeida Silva, Montserrat Freixa Pascual*  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás, Goiânia - GO

*Palavras-Chave:* cristais anarmônicos, modelos tridimensionais, linguagem Maple .

A idéia principal de nosso trabalho consiste em estudar as propriedades dinâmicas de cristais anarmônicos, como por exemplo, os Momentos de Correlação Interatômica (QCM) e os Deslocamentos Relativos Médios (MSRD) entre os átomos em cristais. Consideramos que os principais termos anarmônicos (até quarta ordem) são incluídos na aproximação zero. Esta aproximação é chamada de Aproximação do Campo Autoconsistente Não-Simetrizado onde o estado cristalino é descrito através de uma densidade de probabilidade não simétrica com respeito às transposições de partículas idênticas e cada átomo se movimenta sob a ação de um campo médio criado por todos os outros átomos. Neste método utilizamos a teoria de perturbação até segunda ordem de temperatura e potenciais interatômicos de curto alcance (potencial de Morse). O objetivo principal deste trabalho é desenvolver um conjunto de programas no sistema Maple que nos permite obter as expressões gerais analíticas de QCM e MSRD em redes uni-, bi- e tridimensionais recentemente calculadas<sup>1,2</sup>. A partir destas expressões são analisadas propriedades dinâmicas de diferentes tipos de redes. A concretização de todo o conjunto de programas permite ampliar consideravelmente as possibilidades do método, e reduzir consideravelmente o tempo para obtenção dos cálculos analíticos.

1. Zubov, V. I., Pascual, M. F., Rabelo, J. N. T., *phys. stat. sol. (b)*, v. 175, p. 331-338, 1993.
2. Zubov, V. I., Pascual, M. F., Rabelo, J. N. T., and Faria, A. C., *phys. stat. sol. (b)*, v. 182, p. 315-323, 1994.

(CNPq)

## RECIPILOT 1.0 PROGRAMA PARA VISUALIZAÇÃO DE ESPAÇO RECÍPROCO

*Erlon Henrique M. Ferreira & Nivaldo L. Speziali*  
Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas  
Universidade Federal de Minas Gerais

*Palavras-chave:* espaço recíproco, modulação, grupo de espaço

O desenvolvimento do programa *Reciplot 1.0* teve a finalidade de possibilitar a análise do espaço recíproco de cristais normais e cristais modulados, a partir de resultados de medidas de difração de raios X. Uma análise do espaço recíproco de um cristal pode ser fundamental no processo de estudos estruturais, sobretudo na determinação de grupos de superespaço, como é o caso de estruturas moduladas.

O programa *Reciplot 1.0* foi totalmente desenvolvido em ambiente Windows 3.1, em linguagem Pascal, usando-se o compilador Borland Pascal 7.0 for Windows e o compilador de recursos Borland WorkShop. No seu desenvolvimento aproveitaram-se ao máximo os recursos disponíveis para tal ambiente.

A utilização deste programa é de bastante simples e sua execução se resume, basicamente, a três etapas:

- leitura do arquivo de reflexões (*input*);
- leitura dos parâmetros de rede (*input*);
- visualização de diferentes planos da rede recíproca (*output*).

O arquivo de reflexões pode conter resultados de medidas feitas com 3 (cristais normais) ou mais (cristais modulados) índices. O programa permite a geração dos pontos equivalentes por operações de simetria de grupos de ponto. Como resultado final se obtém a distribuição de intensidades em diferentes planos recíprocos conforme escolha do usuário. Tais planos são visualizados na tela do computador e podem ser impressos em papel. A análise dos mapas obtidos permite concluir, a partir da observação de ausências sistemáticas, sobre os possíveis grupos de espaço ou de superespaço para a solução da estrutura.

(CNPq; FAPEMIG)

## POLINÔMIOS AUTO-SIMILARES PARA IRRACIONALIDADES NÃO-QUADRÁTICAS

B.J.O. Franco e K.Balzuweit

Departamento de Física-Universidade Federal de Minas Gerais

**Palavras-Chave:** Fibonacci, quasiperiodicidade, auto-similaridade

Após a descoberta da liga quasicristalina Al-Mn com simetria pentagonal, sistemas quasiperiódicos passaram a despertar grande interesse. Dois trabalhos recentes (T. Dotera, Phys. Rev. B, 38(1988);11534; T. Suzuki e T. Dotera, J. Phys. A 26 (1993), 6101) consideraram, no estudo de problemas eletrônicos de um cristal 1D, o uso do método da matriz transferência. O método se baseia no cálculo do traço da matriz de transferência em termos de um conjunto de polinômios auto-similares para a sequência de Fibonacci de terceira-ordem, definida por:  $A \rightarrow ABC$ ,  $B \rightarrow A$ ,  $C \rightarrow B$ . Utilizamos o modelo Tight-Binding para a equação de Schrödinger que na forma matricial é escrita como  $\Psi_{i+1} = T(i)\Psi_i$ . Para o nosso caso temos cinco matrizes  $T(i): T_{CC}, T_{BC}, T_{AB}, T_{CA}$  e  $T_{BA}$ . Uma relação de recorrência para o produto de matrizes  $T(i)$  nos conduz a uma relação de recorrência nos traços, o que nos permite determinar os polinômios  $F_n(x)$  (auto-similares). Os polinômios obtidos apresentam uma estrutura auto-similar. São funções contínuas constituídas por uma relação de recorrência com "semente" contendo um parâmetro  $r$  que representa a intensidade de quasiperiodicidade. Seus graus são os números de Fibonacci de terceira ordem (1, 3, 5, 9, 17, 31, ...). Eles são generalizações dos polinômios de Chebyshev para o caso quasiperiódico. Fazendo  $r=1$  (cristal periódico), obtemos os polinômios de Chebyshev de primeira espécie.

## DETERMINAÇÃO DA FASE ATRAVÉS DE UM TRATAMENTO AUTO-CONSISTENTE DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

*Dionicarlos Soares de Vasconcelos, Helio Silva Campos e Wlodzimierz Aleksander Keller*  
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

**Palavras-Chave:** cristal perfeito, difração, auto-consistência

A determinação da fase nos processos interativos da radiação eletromagnética num cristal é de grande importância na análise do comportamento do campo. Authier, em 1986, apresentou um perfil para a variação da fase, resultante de uma reflexão simétrica de GaAs [111]. Curvas desse tipo são bastantes significativas na interpretação de resultados experimentais realizados com estruturas cristalinas cada vez mais perfeitas utilizando-se feixes de raios-X gerados na radiação sincrotron.

Este trabalho constitui uma aplicação de um formalismo que incorpora o princípio da auto-consistência de Ewald, onde o campo difratado para cristais perfeitos, no caso simétrico de Bragg. Foram considerados os parâmetros cristalográficos do Si, do GaAs e do Si-GaAs, nas seguintes situações: a) para um modelo de cristal infinito, sem absorção; b) para um modelo de cristal finito, com e sem absorção. Já na primeira situação, os nossos resultados para a reflexão em monoestruturas, reproduziram a curva obtida por Authier onde a fase mostra-se constante e igual a  $+\pi$  na região anterior à faixa angular central de incidência e, igual a 0 na região posterior. Para o Si-GaAs, os perfis de reflexão indicam um acoplamento de oscilações com intervalos alternados de  $+\pi$  a 0 e de  $+\pi$  a  $-\pi$ . No caso de cristal finito, sem absorção, a fase da reflexão oscila entre  $-\pi/2$  e  $+\pi/2$  na região anterior e entre  $-\pi$  e  $+\pi$ , na região posterior, enquanto que a fase da transmissão oscila continuamente entre  $-\pi$  e  $+\pi$ . Quando um fator de absorção é introduzido, a atenuação sofrida pelo campo é claramente observada através do perfil da fase. Em conclusão temos: a) determinação precisa das diferenças da fase do campo difratado; b) as variações de fase, dependentes da região de incidência angular, no caso da reflexão; c) a aplicação do formalismo em modelos de cristais perfeitos, independente da espessura e da radiação utilizada.

## ANALISE ESTRUTURAL DO SAL KBr LIQUIDO E SOLIDO POR EXTENDED X-RAY ABSORPTION FINE STRUCTURE ( EXAFS).

*J. M. Rosolen<sup>\*</sup>, A. Di Cicco<sup>†</sup>, R. Tossici<sup>‡</sup>, R. Marassi<sup>§</sup>, J. Rybicki.<sup>@</sup>*

<sup>\*</sup> Instituto de Quimica de São Carlos-IQSC-USP.

<sup>@</sup> Fac. Thech.Phys and Appl.Math, University of Gdansk.

<sup>†</sup> Dip. di Fisica e Matematica- Università di Camerino.

*Palavras-chave:* distribuição-radial, multiplo-scattering, dinâmica-molecular.

Uma detalhada análise da estrutura fina do espectro de absorção do composto iônico KBr na "K-edge" do Br. em T = 300K (RT), 943K e 1020K, foi realizada utilizando um método baseado na teoria de multiplo-scattering [1]. A preparação das amostras foi feita dispersando aleatoriamente o pó de KBr em uma matrix de BN por meio de uma solução de acetona agitada e submetida a tratamento de ultra-som. Depois da secagem dos pós em vácuo, pastilhas da dispersão foram preparadas dentro de uma "dry-box". Tal procedimento garante uma perfeita uniformidade das amostras, requisito fundamental para a medida EXAFS. Para o aquecimento das amostras foi utilizado um forno de quartzo com janelas de Kapton, capaz de suportar vácuo de até 10<sup>-6</sup> Bar, tampa de teflon com eletrodos de aço-inox refrigerados por água e um recipiente de grafite para a fixação e aquecimento das amostras. As medidas de absorção foram feitas nas beam-lines D44 ( EXAFS IV ) e D42 ( EXAFS-I ) LURE. Depois da extração do background com excitação "double-electron" [2], "best-fiting" foram conduzidos usando um modelo de função de distribuição radial dos primeiros vizinhos (DR) principalmente assimétrica. Para o caso do líquido o sinal modelo foi extraído diretamente das funções de distribuição Br-Br e Br-K geradas da dinâmica molecular. Os resultados demonstram que a coordenação do sólido se mantém no líquido para os primeiros vizinhos; no líquido ocorre uma contração das distâncias de ligação com relação ao sólido; um modelo de distribuição simétrica para o sólido RT produz distâncias de ligação muito menores do que as previstas pela difração.

1-A.Filliponi, A.Di Cicco and C.R.Natoli, Physical Review B, 52, 1 (1995).

2-E.Buratini, P.D.Angelo, A. Di Cicco, A.Filliponi and N.V.Pavel, J. of Phys.Chem., 97, 5486 (1993).

## LEVANTAMENTO PARCIAL DO DIAGRAMA DE FASES DE QUASE-EQUILÍBRIO DO SISTEMA Fe-Co-Nb

*Maria de Fátima Satuf Rezende e Aba Israel Cohen Persiano*  
Departamento de Física-Universidade Federal de Minas Gerais

*Palavras-Chave:* Fe-Co-Nb, diagrama de fases, ordenamento estrutural

A ausência de literatura referente ao diagrama de fases do sistema ternário Fe-Co-Nb nos motivou a fazer o levantamento parcial do mesmo na condição de quase-equilíbrio. Nossa análise se refere à região rica em Fe e Co (até cerca de 70 at%Co) e teores de Nb até cerca de 33 at%. Trabalhamos com ligas ternárias equiatômicas em Fe e Co e contendo 3,2-13,4at% Nb e binárias Fe-Co contendo 40-60 at%Fe, preparadas por fusão a arco, tratadas termicamente a 1100°C e resfriadas no forno. As técnicas experimentais empregadas são espectroscopia Mössbauer, microscopia óptica/eletrônica de varredura e microanálise-EDX. Encontramos, de maneira inequívoca, que apenas duas fases estão presentes no intervalo analisado. São elas: a fase  $\alpha$ , ferromagnética, com superestrutura B2-ordenada ou bcc-desordenada e a fase  $\epsilon$  (fase de Laves), paramagnética, com estrutura hexagonal do tipo MgZn<sub>2</sub>, que sofre transição para cúbica do tipo MgCu<sub>2</sub> quando rica em Co. Indicamos a existência de um continuum de fases de Laves entre o ponto Fe<sub>2</sub>Nb, na aresta Fe-Nb, e o ponto Co<sub>2</sub>Nb, na aresta Co-Nb, dentro de uma faixa de variação composicional de até 7at%Nb. Outra característica importante que encontramos nesse diagrama é a presença de um vale eutético estendendo-se entre 10,6at%Nb e 14,5at%Nb sobre as duas arestas mencionadas, respectivamente. Fazemos a correlação entre as alterações nas propriedades estruturais (aumento do volume da fase  $\alpha$ -desordenada) e magnéticas (aumento do campo hiperfino de  $\alpha$ ), por efeito de variações microcomposicionais, discutindo a redução do teor de Co em  $\alpha$ , pela produção da fase  $\epsilon$ . Concluímos que o desbalanceamento da relação Fe/Co em  $\alpha$  justifica o uso do elemento Nb como adição ternária às ligas FeCo com o objetivo de retardar o processo de ordenamento desse sistema binário.

(FAPEMIG, CNPq, FINEP, PRPq-UFMG)

## ISOTERMAS E ESTABILIDADE DA FASE FCC DO FULERENO C<sub>60</sub>

V.I.Zubov, J.F.Sanchez, N. P. Tretiakov, A.A.Caparica, and I.V.Zubov  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

*Palavras-Chave:* 1) Dinâmica de rede; 2) anarmonicidade; 3) fulerenos

Neste trabalho prosseguimos os cálculos das propriedades termodinâmicas da fase de alta temperatura do fulereno C<sub>60</sub> levando em consideração os graus de liberdade internos e a anarmonicidade das vibrações da rede que se torna forte a temperaturas acima de 700 K. O método correlativo do campo autoconsistente não-simetrizado para cristais fortemente anarmônicos<sup>1</sup> é utilizado. Usamos também os dados disponíveis (teóricos e experimentais) sobre o espectro vibracional da molécula. Calculamos as isotermas deste fulereno a partir da linha de coexistência com a fase ordenada de baixa temperatura e até a temperatura estimada de perda de estabilidade da molécula. Empregamos o potencial de interação de Girifalco e a aproximação deste potencial proposta por Yakub. Cada isoterma contém duas ramas  $V_1(P) < V_2(P)$ , que convergem a uma certa pressão. Para a rama esquerda,  $B_T(P, V_1) > 0$ , enquanto que para a rama direita  $B_T(P, V_2) < 0$ . Esta última rama coresponde aos estados totalmente instáveis. Ao longo das isotermas estáveis, calculamos o conjunto completo das propriedades termodinâmicas de equilíbrio, inclusive os componentes do tensor elástico. Para os valores baixos de T e P, os dois potenciais dão resultados semelhantes e que coincidem bem com os dados experimentais. Porém, a divergência entre os dados obtidos por meio dos dois potenciais cresce com T e P.

I. V.I.Zubov, N.P.Tretiakov, J.N.Teixeira Rabelo and J.F.Sanchez *Phys. Lett. A*194, 223 (1995).

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE CRISTAIS ANARMÔNICOS COM TEORIA DE PERTURBAÇÕES E EXPANSÕES EM CUMULANTES

José Nicodemos T. Rabelo, Montserrat F. Pascual, Viatcheslav I. Zubov  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

*Palavras-Chave:* termodinâmica, anarmonicidade, cumulantes

Neste trabalho calculamos as propriedades termodinâmicas de uma cadeia linear infinita monoatômica em que cada átomo interage com todos os vizinhos (interação de longo alcance). O objetivo principal é mostrar os efeitos de forte anarmonicidade. Os principais termos anarmônicos, até quarta ordem, são incluídos numa aproximação zero conhecida como Aproximação do Campo Autoconsistente Não-Simetrizado, em que cada átomo é descrito por uma função de distribuição configuracional não simétrica localizada num sítio da rede e se movimenta sob a ação de um campo médio criado por todos os outros átomos. Os termos anarmônicos mais elevados (quinta e sexta ordens) são incluídos de duas formas diferentes: usando expansão da teoria termodinâmica de perturbação<sup>1</sup> e expansão em cumulantes<sup>2</sup>. A comparação dos resultados obtidos por cada um desses procedimentos permite que façamos uma estimativa da convergência das expansões e portanto da qualidade da aproximação zero. Uma discrepância muito pequena nos resultados indica que os termos anarmônicos de quinta e sexta ordens são bem inferiores aos de quarta ordem. A análise mostra também que os termos superiores à quinta e sexta ordens podem ser desconsiderados. Com base na solução da equação de estado determinamos as ramas estável e instável das isobaras. Ao longo das isobaras estáveis calculamos a energia interna da cadeia, os calores específicos a volume e pressão constantes, as compressibilidades isotérmica e adiabática e o coeficiente de dilatação térmica.

1. V.I., Zubov, *phys. stat. sol. (b)* 87, 385; 88, 43 (1978)

2. V.I., Zubov; M.F. Pascual, *Izv. Vuzov - Fizika* 6,67(1984)

(CNPq)

## CORRELAÇÕES INTERATÔMICAS E DESLOCAMENTOS RELATIVOS MÉDIOS QUADRÁTICOS EM UM MODELO DE CRISTAL COM REDE BCC

*Clóves Gonçalves Rodrigues, Montserrat Freixa Pascual,  
Viatcheslav Ivanovich Zubov*

Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

*Palavras-Chave:* cristais anarmônicos, rede bcc, fraca anarmonicidade

O Método Correlativo Não Simetrizado do Campo Autoconsistente (CUSF) é usado para estudar os Momentos de Correlação Interatômica (QCM) e os Deslocamentos Relativos Médios Quadráticos (MSRD) em cristais anarmônicos. O MSRD entre os átomos em cristais expressam as amplitudes efetivas das vibrações dos átomos próximos dos sítios da rede, sendo esta propriedade uma das características mais importantes da dinâmica de rede. Neste trabalho utilizamos a segunda ordem da teoria de perturbação e o CUSF para calcular QCM e MSRD em um modelo de cristal anarmônico com rede cúbica de corpo centrado. São calculados QCM e MSRD entre primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos. Comparando os resultados encontrados com outros obtidos previamente<sup>1</sup> (redes quadrada, hexagonal e cúbica simples) obtivemos que a correlação diminui com o aumento do primeiro número de coordenação,  $Z$ , e aumenta com a dimensão,  $n$ , da rede. Este comportamento é devido a dispersão provocada pelo aumento do número de átomos vizinhos. Quanto ao desvio relativo médio quadrático existe um decréscimo nele à medida em que se aumenta a distância interatômica.

1. V. I. Zubov, M. F. Pascual and C. G. Rodrigues, *Mod. Phys. Lett.* B9, 839 (1995).

(CAPES, CNPq)

## **PROJETO E MONTAGEM DE FORNOS DE ALTA TEMPERATURA COM OTIMIZAÇÃO DE PERDAS CALORÍFICAS CONTROLADO VIA MICRO**

Omena, H. A. ; Dantas, N.O.; Stabile, M.A.; Machado, R. G.; Hayashida, R.  
Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia,  
Laboratório de Novos Materiais Isolantes e Semicondutores (LNMIS)  
Caixa Postal 593, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil

*Palavras-Chaves:* fornos, monitoração, otimização

Visando a construção de fornos de alta temperaturas para crescimento de materiais amorfos (vidros especiais) com otimização de perdas, baixa inércia e taxa de aquecimento controlada via micro, projetamos e montamos um forno constituído de uma câmara refratária quadrada com canaletas para espirais de resistência elétrica, uma resistência para 1300°C espiralada, tijolo refratário para 1300 °C e lã de vidro como isolantes, folhas de papel alumínio e um termopar para o sensoriamento do aquecimento. No revestimento colocamos duas camadas, uma de tijolo refratário e outra de lã-de-vidro devido ao fato de que os materiais que resistem a altas temperaturas não são bons isolantes. Utilizando um controlador de potência tiristorizado, monitoramos o aquecimento em função da potência e do tempo, rastreando com o termopar as temperaturas ao longo deste revestimento até a saturação do aquecimento estabilizar as temperaturas. Observamos os valores atingidos nas camadas do revestimento e inserimos folhas de papel alumínio entre essas camadas em posições cujas temperaturas eram suportáveis pelo papel. Com isso a saturação do aquecimento ocorreu num nível superior. Obtemos deste modo um ganho significativo de aquecimento devido a otimização das perdas por radiação pela superfície de alumínio. De posse dos dados do monitoramento, estipulamos a função de transferência do forno que desenvolvida num software de controle, nos permitiu um controle eficaz da taxa de aquecimento via microcomputador IBM-PC e interfaces.

(CNPq / FAPEMIG)

## **Detectores para monitorar a intensidade e a posição de um feixe de raios-X**

*Edilson Tamura, Renato M. Angelo, Ricardo Margadona, Hélio Tolentino,*  
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq

*Palavras-Chaves:* detectores, raios-X

Apresentamos aqui os resultados obtidos com uma câmara de ionização e um detector baseado em fotodiodos PIN na monitoração da intensidade e da posição de um feixe de raios-X. Estes detectores serão utilizados nas estações experimentais da fonte de luz síncrotron que está sendo construída pelo Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS.

A calibração da câmara, ou seja, a relação entre a corrente gerada pela câmara e a intensidade de fótons incidentes, a curva de saturação, a estabilidade e a relação sinal/ruído foram estudados utilizando diferentes gases (N<sub>2</sub>, He, Ar, P-10) a diferentes pressões. Além disso foi desenvolvida e caracterizada a eletrônica de leitura da câmara de ionização, sendo os resultados comparados com um eletrômetro comercial da Keithley model. 617.

O segundo detector, utiliza dois fotodiodos PIN e um filtro espalhador. A eletrônica utilizada é a mesma desenvolvida para as câmaras de ionização. O feixe de raios-X atravessa o filtro e os fótons espalhados são detectados pelos fotodiodos. Através da corrente gerada pelos fotodiodos é possível obter-se a intensidade e a posição do feixe. A caracterização, utilizando um tubo de raios-X convencional, mostra uma sensibilidade para deslocamentos de 100 µm, para um feixe de 1 mm de altura.

## PROJETO PARA A INSTALAÇÃO DE UM CENTRO DE MICROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO NO LNLS

*Daniel Ugarte, Osmar R. Bagnato, Cylon E.T. da Silva*

Lab. Nac. Luz Síncrotron (CNPq / MCT), Cx. P. 6192, 13081-970 Campinas SP, Brasil.

**Palabras-Chave:** microscopia eletrônica, ciência de materiais, facilidade multi-usuário

Entre as ferramentas microestruturais mais populares para a análise dos materiais utiliza-se a difração de raios X, espectroscopia de absorção de raios X, etc. Estas técnicas, embora eficientes, não realizam sozinhas todos os requisitos de caracterização necessários na moderna ciência dos materiais. A maioria destes equipamentos fornecem dados de excelente qualidade, mas de uma região grande da amostra ( $\approx$  mm, ou sub-mm com as fontes de luz síncrotron de elevado brilho). No presente, a alta resolução espacial ( $<$  escala nanométrica) é requerida na caracterização de muitos materiais sintéticos como os semicondutores, multicamadas magnéticas, silício poroso, etc. Ambos caminhos resolução espacial (local) e a informação média são complementares e não podem ser eliminadas da ciência e tecnologia moderna e competitiva. A proposta é a criação de um centro de microscopia eletrônica (transmissão e varredura), especialmente orientado para estudos de alta resolução espacial. Estas técnicas constituem umas das ferramentas básicas da pesquisa avançada em química e física do estado sólido e embora os trabalhos de vários grupos de pesquisa atuem na área de nanoestruturas dos materiais, observa-se carência de técnicas de caracterização subnanométrica no país. O centro de microscopia eletrônica de alta resolução propõe o preenchimento desta lacuna num prazo tão curto quanto possível, e será organizado como um centro aberto multi-usuários ligado ao Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, aberto a usuários qualificados do país, e onde será possível desenvolver trabalhos num local estimulante e com elevada competitividade. Atualmente, projetos estão sendo elaborados à fim de requerer financiamento para microscópios eletrônicos e laboratório de preparação de amostras nas agências de fomento estaduais e federais.

## ESTAÇÃO EXPERIMENTAL PARA ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO DE RAIOS X

*M.C. Martins Alves, H. Tolentino, E. Tamura, F. Vicentin, C.G. de Mayolo, V.  
Compagnon*

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS/CNPq  
Cx. Postal 6192, 13081-970 Campinas (SP)

**Palavras-chave :** XAFS, luz síncrotron

A técnica de XAFS (X-ray Absorption Fine Structure) é uma poderosa ferramenta para o estudo de materiais, incluindo os que apresentam ordem a longa distância (monocristais, policristais, etc..) assim como os desordenados (vidros, amorfos, etc..). Ela é particularmente eficaz e, em muitos casos única, no estudo da ordem local de sistemas complexos - compostos de vários elementos - e/ou diluídos. O LNLS possui uma estação experimental de XAFS instalada no laboratório CAMD (Center for Advanced Microstructures and Devices, Louisiana, USA) com monocromador, detectores e eletrônica de controle desenvolvidos no LNLS. Este ano foi aprovado pela FAPESP um projeto de pesquisa com o objetivo de implantar, desenvolver e utilizar a espectroscopia de absorção de raios X no LNLS. Vários pesquisadores de diferentes instituições brasileiras estão engajados na utilização desta linha de luz. Podemos citar pesquisadores de diferentes Estados e Instituições: CENPES, USP, UNICAMP, UFSCar, UNESP, UFRJ, UFBA, UFSC, UFPR, UFRGS. Entre os temas a serem desenvolvidos podemos citar o estudo de propriedades eletrônicas e estruturais de vários materiais, tais como, óxidos e sulfetos de metais de transição (catalisadores, vidros de semicondutores e de borossilicatos, cerâmicas e dispositivos eletrocromáticos), filmes finos e ligas magnéticas, assim como complexos de metais de transição e polímeros condutores dopados com metais.

(LNLS, FAPESP)

## SISTEMA DE CONTROLE DE TEMPERATURA DAS ESTRUTURAS ACELERADORAS DO LINAC DE 100 MeV DO LNLS

*Guilherme B. Fraguas<sup>(1)</sup> Manuel H. de Gouveia Jr.<sup>(1)</sup>  
Álvaro L. Cerone Rosa<sup>(1)</sup>, A. Ricardo D. Rodrigues<sup>(1,3)</sup>, A. Rubens B. de Castro<sup>(1,3)</sup>*

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron  
Caixa Postal 6192, 13083-970 Campinas, SP

<sup>(2)</sup>IFGW - UNICAMP, Campinas, SP

<sup>(3)</sup>Instituto de Física - USP, São Carlos, SP

*Palavras-chave:* aceleradores, instrumentação, controle

Neste trabalho descrevemos a implementação de um sistema de controle de temperatura estável operando em  $45 \pm 0.1^\circ\text{C}$ , responsável pelo aquecimento das estruturas aceleradoras do LINAC - Acelerador Linear de 100 MeV, utilizado para injeção primária do anel de armazenamento do LNLS. A aceleração dos elétrons é feita por injeção de RF no interior das estruturas do LINAC que funcionam como guias para uma onda caminhante de RF cujo campo elétrico acelera os elétrons. A sintonia destes guias é fortemente dependente da temperatura, daí a necessidade de que esta seja mantida, dentro de estreitas margens de tolerância, no valor recomendado pelo fabricante. O sistema de controle consiste em um circuito hidráulico fechado, onde cerca de 500 litros de água desmineralizada fluem em alta velocidade pelas paredes externas das estruturas. No circuito é inserido um aquecedor indutivo de 15 kW e um radiador, também de 15 kW, responsável por retirar o excesso de potência do sistema. O controle do aquecedor é feito por um microcontrolador lógico programável responsável pelo ajuste fino da temperatura. O radiador é acionado por um controlador PID implementado em um programa dedicado que rodando em ambiente Windows 95 funciona também com display em tempo real do *status* do sistema. Os resultados obtidos durante os primeiros testes do acelerador em dezembro passado foram plenamente satisfatórios confirmando a estabilidade de  $\pm 0.1^\circ\text{C}$  na temperatura da água, medida independentemente. Um sistema similar de controle está sendo implementado para cavidade de RF do anel de armazenamento, com uma dissipação de 35 kW, onde o radiador é substituído por um trocador de calor e uma válvula de três vias acionado por motor.

## FENDAS DE ENTRADA E SAÍDA PARA ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO COM LUZ SÍNCROTRON

*Augusto José Reis Oliveira<sup>(1)</sup>, Paulo de Tarso Fonseca<sup>(2)</sup>,  
José Geraldo Pacheco<sup>(2)</sup>, José Cristiano Valentin da Silva<sup>(2)</sup>,  
Antonio Rubens Britto de Castro<sup>(2,3)</sup>*

<sup>(1)</sup>Faculdade de Engenharia Mecânica, USP - São Carlos, SP

<sup>(2)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - Campinas, SP

<sup>(3)</sup>Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP - Campinas, SP

*Palavras-Chave:* fendas, espectroscopia, síncrotron

As fendas seletoras de luz para a "linha de luz com monocromador de grades esféricas" do LNLS tem algumas propriedades notáveis. Com comprimento de 40 mm, a largura é ajustável de 0 a 0.6 mm e de 0.6 a 4 mm, continuamente. O mecanismo baseia-se na deformação elástica de juntas finas em paralelogramos de braços rígidos. Um conjunto monolítico com dois paralelogramos foi usinado em duralumínio. Cada paralelogramo suporta uma lâmina da fenda. O esquema garante movimento estritamente paralelo das bordas das lâminas, desde fechamento completo até a máxima abertura (4 mm), com uma única peça móvel, uma cunha cônica inserida entre os dois paralelogramos. O movimento da cunha é guiado por um translador de precisão com parafuso micrométrico. As lâminas (de aço inox) tem bordas retificadas e polidas com precisão de 0.001 mm. O conjunto foi montado em uma flange CF63. O paralelismo e precisão do movimento das bordas foi aferido (i) examinando padrões de difração da luz de um laser HeNe; (ii) com microscópio ótico e retículo de precisão. Obtem-se precisão melhor que 0.01 mm sobre um comprimento útil de cerca de 40 mm e sobre toda a faixa de larguras. A câmara de vácuo inclui um porto para observação da luz síncrotron incidindo sobre a fenda. O condicionamento para vácuo consistiu em limpeza padrão e baking de 72 horas a 200 Celsius contra uma bomba iônica de 60 l/s. Agradecemos a R. Reininger (SRC, Wisconsin, USA) por nos ter enviado o projeto de fendas de SRC, no qual este se baseou, e a Oficina Mecânica do LNLS pela usinagem de precisão.

## LÂMINAS QUARTO DE ONDA PARA O DICROISMO CIRCULAR MAGNÉTICO DE RAIOS-X EM MODO DISPERSIVO EM ENERGIA

C. Giles<sup>1,2</sup>,

C. Malgrange<sup>3</sup>, J. Goulon<sup>1</sup>, F. de Bergevin<sup>4</sup>, C. Vettier<sup>1</sup>, A. Fontaine<sup>5</sup>, S. Pizzini<sup>5</sup>

<sup>1</sup>European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPq, Campinas-SP

<sup>3</sup>Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie, Universités de Paris 6 et 7, Paris

<sup>4</sup>Laboratoire de Cristallographie, CNRS, Grenoble

<sup>5</sup>Laboratoire de Magnétisme Louis Néel, CNRS, Grenoble

**Palavras-Chave:** luz síncrotron, polarização de raios-X, dicroísmo circular magnético de raios-X.

Este trabalho descreve o desenvolvimento de lâminas quarto de onda para raios-X produzidos por fontes de radiação síncrotron. Estas lâminas quarto de onda permitem a transformação da alta taxa de polarização linear produzida por fontes convencionais de luz síncrotron em polarização circular. Novas técnicas experimentais para o estudo do magnetismo a nível atômico utilizam raios-X circularmente polarizados, como o Dicroísmo Circular Magnético de Raios-X (XMCD). Esta técnica permite a medida separada dos momentos de dipolo magnético orbital e de spin. A originalidade deste trabalho consiste no desenvolvimento de lâminas quarto de onda para os raios-X (utilizando cristais de diamante com 1 mm de espessura) que transformam a polarização linear em polarização circular simultaneamente para aqueles comprimentos de onda que permitem a medida de espectros de XMCD de 100 eV a 250 eV, em torno das bordas de absorção  $L_2$  e/ou  $L_3$  de terras raras (Pr, Gd, Ho, Tm, etc.) em compostos ferromagnéticos. A taxa de polarização circular produzida, assim como a uniformidade da polarização em todo o espectro de XMCD, são avaliados comparando-se os espectros obtidos por esta técnica com aqueles obtidos pela técnica convencional. A intensidade do feixe circularmente polarizado (de 20% a 40% do feixe incidente) e a taxa de polarização circular obtida com a lâmina quarto de onda (de 65% a 80%) são mais elevados do que os obtidos pela técnica convencional (10% e 60%, respectivamente).

(ESRF, CNRS, RHA/CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO DA ESTAÇÃO EXPERIMENTAL DE SAXS DO LNLS

Guinther Kellermann<sup>(1,2)</sup>, Julio C. Cezar<sup>(1,3)</sup>, Flavio C. Vicentin<sup>(1)</sup>, Milton C. Rocha<sup>(1)</sup>,

Antonio A. O. Carneiro<sup>(4)</sup>, Edilson Tamura<sup>(1)</sup>, Hélio C. N. Tolentino<sup>(1)</sup>,

Iris L. Torriani<sup>(3)</sup>, Aldo F. Craievich<sup>(1,2)</sup>

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq <sup>(2)</sup>Instituto de Física - USP, São Paulo, SP

<sup>(3)</sup>Instituto de Física - UNICAMP <sup>(4)</sup>Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia, BA

**Palavras-Chave:** caracterização, monocromador, espelho

A estação experimental de espalhamento de raios-X a baixo ângulo do LNLS se encontra em estágio final de construção. Constitui-se de: espelho cilíndrico com cobertura de ouro para focalização vertical, monocromador de cristal de silício elasticamente curvado para focalização horizontal do feixe, obturadores secundários, banco ótico com rotação 2 $\theta$ , sistemas de fendas para limitar o tamanho do feixe nas direções vertical e horizontal, porta-amostras múltiplo, filtros atenuadores, monitores de intensidade do feixe incidente e transmitido através da amostra, caminhos de vácuo, dispositivo para posicionamento preciso do "beam-stopper" e detectores de raios-X sensíveis à posição. Serão apresentados os resultados da caracterização no que se refere a: i) qualidade de focalização vertical do espelho, ii) condições de vácuo e do mecanismo de focalização do monocromador, iii) estabilidade de posição vertical e horizontal do feixe monocromático, iv) homogeneidade, resolução espacial e linearidade dos detectores. As caracterizações do monocromador e espelho foram feitas utilizando-se uma fonte de raios-X convencional. No monocromador utilizou-se um cristal de silício com plano de reflexão (111) e ângulo de assimetria de 11° atuando em modo condensador. As larguras a meia altura horizontais do feixe monocromático medida na posição da mostra e na posição do detector foram respectivamente 5.0 e 1.2 mm. A incidência do feixe no espelho se dá em um ângulo de 7 mrad com refletividade de 80% para fótons com energia de 8 keV. A largura a meia altura vertical do feixe obtida no plano da imagem foi de 1.4mm. Na caracterização dos detectores sensíveis a posição observaram-se variações espaciais da eficiência da ordem de 8% exceto na parte central onde variações de até 20% foram encontradas. As variações da parte central serão corrigidas mediante a substituição do discriminador utilizado. A resolução espacial determinada para esses detectores foi de aproximadamente 280  $\mu$ m.

## DESENVOLVIMENTO DE UM CONTROLADOR DIGITAL DE TEMPERATURA PARA CONTROLE E MONITORAÇÃO DE SISTEMAS FÍSICOS DE AQUECIMENTO

*Stabile, M.A.; Dantas, N.O.; Hayashida, R.; Machado, R.G.; Omena, H.A.*

Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia,

Laboratório de Novos Materiais Isolantes e Semicondutores (LNMIS)

Caixa Postal 593, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil

*Palavras-chave:* controlador, conversor, aquecimento

Desenvolveu-se no LNMIS um controlador universal para sistemas de aquecimento utilizados no crescimento e caracterização de amostras vítreas, utilizando-se técnica digital de aquisição de dados, obtendo-se uma grande eficiência e versatilidade. O sistema é composto de um amplificador de instrumentação utilizando amplificadores operacionais J-FET, o qual irá amplificar o sinal de um termopar (tipos K, R ou S), que é enviado a um conversor analógico-digital de 12 bits baseado no CI ADS7800, fornecendo uma leitura estável e com precisão mínima de 0,5 °C. O sinal proveniente do conversor A/D é enviado a uma das três portas paralelas programáveis do CI 8255A que faz a comunicação com o barramento do micro; esta informação é tratada por um software dedicado, aplicando a função de transferência adequada a cada planta, devolvendo uma resposta no sentido de corrigir a temperatura do sistema. Esta resposta é enviada pelo programa, a um conversor digital-analógico de 8 bits DAC08, conectado a um módulo de potência com controle por fase Full-Wave. O controle de potência é conseguido variando-se o período dos pulsos gerados em um oscilador de relaxação (Trigger) sincronizado com a rede de alimentação CA, baseado no TUJ 2N2646 que dispara um tiristor para 25 Ampères tipo TIC263, controlando seu ângulo de disparo e consequentemente a potência entregue aos elementos de aquecimento.

(CNPq / FAPEMIG).

## CARACTERIZAÇÃO DE UM SISTEMA DE SAXS PARA MEDIDAS EM ESCALA ABSOLUTA DE INTENSIDADE

*Guinther Kellermann, Aldo F. Craievich*

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/CNPq

Caixa Postal 6192, 13083-970 Campinas, SP

Instituto de Física - USP, São Paulo, SP

*Palavras-Chave:* SAXS, carbono, superfície

O conhecimento da intensidade de espalhamento de raios X a baixo ângulo (SAXS) em escala absoluta permite determinar parâmetros estruturais de grande interesse, tais como: i) peso molecular de macromoléculas em solução. ii) superfície de interface em materiais bifásicos e iii) magnitude das flutuações estatísticas de composição em fases quase-homogêneas de materiais em estado sólido ou líquido. Devido a dificuldade de medir com precisão a intensidade do feixe primário tais resultados são pouco frequentes na literatura de SAXS. Apresentamos aqui os resultados da caracterização de um arranjo experimental construído para medidas de SAXS em escala absoluta e sua aplicação ao caso do carbono vítreo (poroso). Estudou-se a estabilidade do feixe primário bem como a performance do detector sensível a posição e dos dispositivos mecânicos. Neste sistema implementou-se o método da fenda móvel<sup>(1)</sup>. Este permitiu medir a intensidade do feixe primário com um erro de 6% -  $(8,1 \pm 0,5) \times 10^6$  fótons/segundo -. A partir do gráfico de Porod do espalhamento absoluto determinamos a superfície interfásica do carbono vítreo obtendo como resultado  $35\text{m}^2/\text{g}$ .

(1) Stabinger, H. & Kratky, O. "A new technique for the measurement of the absolute intensity of X-ray small angle scattering: the moving slit method", Makromol. Chem. 179, 1665-1669 (1978).

## FABRICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE GUIAS DE ONDA, POR TROCA IÔNICA, EM VIDROS FOSFATOS

*E. B. dos Santos<sup>1</sup>, N. Aranha<sup>1</sup>, O. L. Alves<sup>2</sup> e L. C. Barbosa<sup>1</sup>*

1- IFGW - UNICAMP, P. O. Box 6165 - Campinas - SP - CEP 13081-970

2- IQ - UNICAMP, P. O. Box 6154 - Campinas - SP - CEP 13081-970

*palavras chave: guia de onda, vidro fosfato, troca-iônica*

Guias de ondas planares e/ou canal, em substratos vítreos, tem despertado grande interesse no campo da fotônica para fabricação de dispositivos ópticos. Uma das técnicas mais eficientes para fabricação desses dispositivos é a troca-iônica, onde realizam-se geralmente as trocas entre os íons  $\text{Na}^+/\text{Ag}^+$ .

Neste trabalho estudamos os processos que ocorrem na troca-iônica em vidros niobofosfatos, BK-7 e soda-lime. A troca foi realizada num banho de 45%  $\text{KNO}_3$ , 45 %  $\text{NaNO}_3$  e X%  $\text{AgNO}_3$  ( $X = 10^{-4}$  % à 10 % em massa), à temperaturas de 340 °C e 315 °C, durante 60 minutos. Os guias foram caracterizados pelo método de acoplamento por prisma, utilizando um laser de He-Ne (630 nm), onde pode-se observar os modos guiados. Mediu-se o número de modos e seus respectivos índices de refração efetivo, correlacionando-os com a concentração de  $\text{AgNO}_3$  do banho.

Os vidros niobofosfato apresentaram facilidade de troca-iônica, com excelente desempenho em relação aos vidros comerciais BK-7 e soda-lime. Este fato deve-se basicamente ao tipo de estrutura do material, que no caso dos vidros niobofosfato apresenta um "network" mais aberto.

(CNPQ, PADCT e Telebrás)

## OBTENÇÃO DA MATRIZ VÍTREA ZBNA POR PROCESSO SOL-GEL

*Dorotéia F. Bozano, A. C. de Souza, R. Fornazari, O. da S. Prado e Angela A. S. T. Delben*  
Departamento de Física /CCET - Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

*Palavras -Chaves: vidros de fluoretos, processo sol-gel, análise térmica*

Vidros de fluoretos tem um grande potencial como materiais para transmissão no infravermelho em aplicações em sensores, LASERS, janelas, fibras ópticas para telecomunicações e medicina, e amplificadores ópticos. O processo sol-gel foi desenvolvido, inicialmente, para obtenção de óxidos e tornou possível a produção de novas composições e microestruturas refinadas não disponíveis pelo processo convencional de fusão, levando ao desenvolvimento de materiais com novas e valiosas propriedades. Recentemente, surgiram pesquisas visando preparar a matéria-prima e, eventualmente, os próprios vidros de fluoretos por sol-gel, visando a redução de custos, aumento da pureza e obtenção de produtos com geometria e dimensões desejadas, desde películas até amostras de grandes proporções. O objetivo inicial neste trabalho foi obter vidros ZBNA, baseados em fluoretos de zircônio, bário, sódio e alumínio, a partir de géis contendo os cátions desejados. A solução precursora foi preparada utilizando-se:  $\text{Zr}(\text{OC}_3\text{H}_7)_4$ ,  $\text{Ba}(\text{O}_2\text{C}_2\text{H}_3)_2$ ,  $\text{Na}(\text{OC}_2\text{H}_5)$  e  $\text{Al}(\text{OC}_4\text{H}_9)_3$ , diluídos em isopropanol e água. Ácido acético e agitação por ultrassom foram utilizados para monitorar a taxa de hidrólise e homogeneizar esta solução. A gelificação foi induzida por evaporação do solvente em temperatura próxima de 80°C após 30 dias de envelhecimento da solução precursora. O gel úmido foi secado em temperatura de 100°C em atmosfera ambiente, e então, foi submetido à Análise Exploratória Diferencial com taxa de aquecimento de 10°C/min em atmosfera de ar, sendo que as temperaturas características obtidas foram: temperatura de transição vítrea em torno de 270°C e temperatura do pico de cristalização 422°C. Estes valores são semelhantes aos medidos em vidros ZBNA obtidos por fusão.

(PROPP-UFMS, CNPq)

## DIAGRAMA DE ENERGIA LIVRE E FORMAÇÃO DE AMORFO NO SISTEMA FeZr: MODELO E RESULTADOS EXPERIMENTAIS

*Magale Elisa Brückmann, Andrea Paesano Jr., Sérgio Ribeiro Teixeira e Lívio Amaral*  
Instituto de Física, UFRGS, Caixa Postal 15051, 91501-970 Porto Alegre, Brasil

*Palavras-Chave: diagramas de energia, formação de fases, sistema FeZr*

Diagramas de energia livre representam um importante papel na interpretação de observações a cerca da formação de fases (amorfização, fases cristalinas ou soluções sólidas) obtidas experimentalmente. Em geral, esses diagramas são obtidos através de dados experimentais e de modelos teóricos construídos a partir dos mesmos. No entanto, seja devido às incertezas experimentais ou ao caráter semi-empírico dos modelos, dificilmente encontram-se descritos diagramas completos. Existem na literatura modelos para o cálculo de entalpias de formação de ligas binárias metálicas, onde pelo menos um dos elementos é um elemento de transição. Estes modelos consideram essencialmente efeitos químicos gerados nas interfaces entre os primeiros vizinhos em função das grandezas eletronegatividade, densidade de elétrons e volume atômico. Associando-se a isto, um método que combina a razão dos raios atômicos dos elementos e o calor de formação, pode-se prever quantitativamente a GFA ("less forming ability"), ou mais precisamente, o intervalo de formação de amorfo em ligas metálicas. No presente trabalho descrevemos o método para a construção de um diagrama de energia livre com base neste modelo, ressaltando alguns de seus aspectos, e o aplicamos no caso do sistema Fe-Zr, destacando sua validade e limites. O diagrama assim obtido permite-nos: quantificar a energia livre  $G$  para diferentes fases presentes no sistema Fe-Zr, definir o intervalo de amorfizabilidade para o sistema bem como evidenciar o comportamento da fase amorfa, o qual foi também monitorado em multicamadas de  $Fe_{0,50}Zr_{0,50}$  estudadas através da espectroscopia Mössbauer de elétrons de conversão. Em nossos estudos experimentais previamente desenvolvidos observamos que na concentração 50% átomos de Fe, em filmes finos multicamadas de FeZr amorfizadas via RES a 350°C, forma-se somente uma fase amorfa independente da modulação (soma das espessuras individuais das camadas de Fe e Zr) dos filmes, o que corresponde ao resultado obtido através do modelo para o sistema em questão.

(CNPq, CAPES)

## Efeitos mecânicos superficiais em vidros gerados pela penetração de íons de prata.

*Ricardo D. Meucci, Gilberto Y. Odo, Carlos M. Lepiensi*  
Depto. de Física, Universidade Federal do Paraná.

*Palavras Chave: vidro, prata, propriedades mecânicas.*

A condutividade elétrica em vidros alcalinos é devida à migração de íons alcalinos ( $Na^+$ ,  $K^+$ ) em direção ao catodo. Utilizando um filme de prata como catodo foi verificado que estes íons penetram no vidro substituindo os íons de  $Na^+$  e  $K^+$ . Devido à penetração de  $Ag^+$  são alteradas propriedades mecânicas superficiais do vidro, sendo a ocorrência de trincas um destes fatores. Controlando a espessura do filme de prata utilizado como eletrodo e o valor da carga que circula pelo vidro foram obtidos diferentes espessuras e profundidades da camada de prata no vidro, entre 20 nm e 3  $\mu m$ . A corrente resultante se mantém constante enquanto o eletrodo fornece íons de prata, passando a diminuir quando todos os íons de prata da camada depositada penetram no vidro. Verificou-se que para pequenas penetrações a dureza do vidro determinada por meio de microindentações não era modificada significativamente. Para maiores espessuras ocorre a fragmentação da região onde penetram os íons de prata. Para grandes espessuras da camada de prata pode-se observar a fragmentação da superfície do vidro na região alterada. Essa modificação é atribuída ao maior tamanho do íon  $Ag^+$  quando comparado com os íons  $Na^+$  que deixaram a região próxima à superfície.

(CNPq, PADCT)

## ESPECTROS DE AO EM VIDROS ALUMINOBORATOS DE BÁRIO MODIFICADOS IONICAMENTE POR Cr<sup>3+</sup> e Nd<sup>3+</sup>

(<sup>\*)</sup>Santos, J.G.; (<sup>†</sup>)Dantas, N.O.; (<sup>‡</sup>)Pontuschka, W.M.

(<sup>†</sup>) Instituto de Física da Universidade de São Paulo,  
Caixa Postal 66318, 05389-970, São Paulo, SP, Brasil

(<sup>‡</sup>) Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia,  
Caixa Postal 593, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil

Foram produzidas amostras vítreas à base de aluminoborato de bário com as seguintes composições em mol %: (a) 20Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 50 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 30 BaO mais 0.5 Nd<sup>3+</sup>, (b) 20Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 50 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 30 BaO mais 0.5 Cr<sup>3+</sup> e (c) 20Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 50 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 30 BaO mais 0.5 Nd<sup>3+</sup> mais 0.5 Nd<sup>3+</sup> e 0.5 Cr<sup>3+</sup>. As referidas amostras foram obtidas em um forno de resistência elétrica no ar e utilizando um cadinho de platina. As amostras foram fatiadas e polidas adequadamente para obtenção de espectros de AO na região espectral que vai do infravermelho até o ultravioleta. Os espectros de AO foram obtidos à temperatura ambiente em dois espectrômetros, sendo um para região do infravermelho (Jasco IR-700) e o outro para as regiões do visível e ultravioleta (Carl Zeiss DMR 21). As amostras modificadas ionicamente por ions de Nd<sup>3+</sup> apresentam duas bandas de AO características uma em torno de 875 nm e a outra em torno de 883 nm. Essas bandas são devidas as transições <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> → <sup>4</sup>F<sub>3/2</sub>. As amostras modificadas ionicamente por Cr<sup>3+</sup> apresentam bandas de AO, também, características correspondentes aos seguintes níveis de energia: <sup>4</sup>Γ<sub>4</sub>, <sup>2</sup>Γ<sub>4</sub>, <sup>2</sup>Γ<sub>3</sub> e <sup>4</sup>Γ<sub>5</sub>. Já as modificadas por Nd<sup>3+</sup> e Cr<sup>3+</sup> apresentam, também, as mesmas bandas AO características, apresentando pequenas modificações nas suas intensidades.

(CNPq/FINEP/FAPESP/FAPEMIG)

## SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DO SISTEMA VÍTREO: GeO<sub>2</sub> - Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>

N. Aranha<sup>1</sup>, O. L. Alves<sup>2</sup> e L. C. Barbosa<sup>1</sup>

1- IFGW - UNICAMP, P. O. Box 6165 - Campinas - SP - CEP 13081-970

2- IQ - UNICAMP, P. O. Box 6154 - Campinas - SP - CEP 13081-970

*palavras-chave: vidro dopado com érbio, amplificador óptico, vidros germanatos.*

A partir da descoberta das fibras ópticas dopadas com érbio, para amplificação de sinais em 1.55 μm, novos sistemas vítreos tem sido pesquisados na tentativa de obter "hosts" para terras-raras, como: érbio, ytérbio, praseodímio, etc.. Os vidros germanatos contendo metais pesados, por exemplo, já apresentavam grande interesse tecnológico. Com a incorporação de terras-raras nesses sistemas, abre-se a possibilidade de utiliza-los como amplificadores ópticos.

Neste trabalho apresentaremos os resultados obtidos da preparação e caracterização do sistema: GeO<sub>2</sub> - Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>. Os vidros foram preparados a partir da fusão de óxidos de grau PA, a uma temperatura de 1300 °C por 30 minutos, utilizando cadinhos de alumina. O recozimento foi realizado à 400 °C durante 3 horas. Alguns valôres obtidos para este sistema foram: 1.96 < n<sub>0</sub> < 2.06, ; 4.78 [g/cm<sup>3</sup>] < ρ < 6.58 [g/cm<sup>3</sup>]; 462 [°C] < T<sub>g</sub> < 575 [°C] e 7.69 x 10<sup>-6</sup> [°C<sup>-1</sup>] < α < 14.28 x 10<sup>-6</sup> [°C<sup>-1</sup>]. A faixa de transmissão óptica desses materiais ficou entre 392 nm a 6.4 μm. Realizamos dopagem com 5000 ppm de Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, não observando qualquer tipo de cristalização. O sistema mostrou-se de fácil síntese, gerando vidros com boa qualidade óptica e estabilidade térmica. Os níveis de dopagem com érbio, não provocaram a cristalização do material, indicando a solubilidade desta terra-rara na matriz vítrea. As próximas etapas do trabalho serão a incorporação de outras terras-raras, medidas de fluorescência e a produção de preformas para puxamento de fibras.

(CNPQ, PADCT e Telebrás)

## INVESTIGAÇÃO POR MÖSSBAUER DA COORDENAÇÃO E VALÊNCIA DO FERRO EM VIDROS ALUMINOBORATOS DE CALCIO

*Hiram B. Pascoal, Hercilio R. Rechenberg, Walter M. Pontuschka*  
Instituto de Física/Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* vidros, mössbauer, ferro

Nas últimas décadas varios trabalhos foram feitos usando espectroscopia Mössbauer com o objetivo de conhecer as propriedades estruturais e eletrônicas dos vidros com relação à composição, temperatura e atmosfera de fusão etc. A grande maioria destes estudos são feitos com altas concentrações de ferro favorecendo o aparecimento de aglomerados de íons e até microcristais de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Fizemos uma série de medidas para saber o comportamento do ferro quanto ao seu estado de valência e coordenação com a variação da razão entre  $\text{B}_2\text{O}_3/\text{CaO}$ , usando baixa concentração de ferro. As amostras foram fundidas, com a composição  $(x)\text{CaO}:(80-x)\text{B}_2\text{O}_3:20\text{Al}_2\text{O}_3 + 1,75\text{Fe}_2\text{O}_3$ , ( $x=10 \rightarrow 50$ ) mol%, à temperatura de  $1350^\circ\text{C}$  durante 45 minutos, sendo após recozidas a  $400^\circ\text{C}$  por duas horas. Medidas Mössbauer foram feitas à temperatura ambiente utilizando o método da aceleração constante, com uma fonte de  $^{57}\text{Co}$  em Rh. A concentração de ferro na amostra foi de  $4 \text{ mg/cm}^2$ . O ferro puro foi usado para a calibração da velocidade do espectrômetro e também como referência para o deslocamento isomérico. Os espectros Mössbauer apresentaram três linhas alargadas e que foram atribuídas, com base no deslocamento isomérico e na separação quadrupolar, como sendo uma superposição de dois dubletos:  $\text{Fe}^{+3}$  e  $\text{Fe}^{+2}$ . Verificou-se que o estado de coordenação do  $\text{Fe}^{+3}$  e do  $\text{Fe}^{+2}$  passam de octaédrico para tetraédrico. Observou-se também que a concentração do  $\text{Fe}^{+3}$  aumenta com a diminuição da razão  $\text{B}_2\text{O}_3/\text{CaO}$ . De acordo com os resultados, a introdução de CaO fornece oxigênios adicionais a matriz vítrea para o ferro passar da posição modificadora (octaédrico) para a posição formadora (tetraédrico), além de haver uma transformação do  $\text{Fe}^{+2}$  em  $\text{Fe}^{+3}$ .

(CAPES)

## SUPRESSÃO DE CENTROS DE LACUNAS (BOHC) POR RADIAÇÃO EM VIDROS ALUMINOBORATOS DE BÁRIO

*Hiram B. Pascoal, Walter M. Pontushka, Walter Sano*  
Instituto de Física/ Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* vidros, rpe, radiação

O ferro é conhecido como um inibidor de luminescência em vidros e cristais. Em vidros boratos irradiados com raios-x ou raios- $\gamma$ , ocorre a formação de níveis de energia que são conhecidos como o BEC (centros de elétrons) e o BOHC (centros de buracos). Estudos recentes usando TL [1] verificou-se que a ocorrência de uma luminescência avermelhada em torno de  $470\text{K}$  é devido a recombinação de buracos desarmadilhados dos BOHCs com elétrons do  $\text{Fe}^{+2}$ . Foi também observada que esta luminescência desaparece para concentrações de ferro equivalente a  $0,35 \text{ at\%}$  o que foi atribuído a recombinações não radiativas devido a um orbital molecular deslocalizado de ferro. Investigamos este comportamento fazendo medidas de Ressonância Paramagnética Eletrônica em amostras de vidros com composição  $30\text{BaO}:20\text{Al}_2\text{O}_3:50\text{B}_2\text{O}_3 + (x)\text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $x=0 \rightarrow 2,5$ ) mol%, fundidas a  $1300^\circ\text{C}$  durante 1h sendo posteriormente recozidas a partir de  $400^\circ\text{C}$  com resfriamento lento até temperatura ambiente. As amostras foram moidas e irradiadas com raios- $\gamma$  a uma dose de  $10^7 \text{ R}$  em temperatura ambiente. Medidas de RPE foram feitas na banda-X com o campo externo variando entre  $700 - 5700 \text{ G}$ . Foram detectadas duas linhas correspondentes ao  $\text{Fe}^{+3}$  e ao BOHC. Observamos que a linha correspondente ao BOHC diminui proporcionalmente com o aumento da concentração de ferro até desaparecer em torno de  $0,4 \text{ at\%}$ , coincidindo com o desaparecimento da termoluminescência. Podemos concluir que a completa extinção da luminescência para concentrações de ferro de  $\pm 0,4 \text{ at\%}$  deve-se a captura do BOHC pelos íons  $\text{Fe}^{+2}$  transformando-se em  $\text{Fe}^{+3}$  durante a irradiação e não devido a processos não radiativos.

[1] M. I. T. Oliveira, Dissertação de Mestrado-IFUSP/1993.

(CAPES)

## ESPECTROS DE ABSORÇÃO ÓPTICA E FLUORESCÊNCIA COM RESOLUÇÃO TEMPORAL DE VIDRO ALUMINOBORATO DE BÁRIO MODIFICADO IONICAMENTE POR Ag<sup>++</sup>

<sup>(a)</sup>Bertoni, F.C.P.; <sup>(b)</sup>Dantas, N.O.; <sup>(c)</sup>Pontuschka, W.M.; <sup>(d)</sup>Santos, J.G.

<sup>(b)</sup> Instituto de Física da Universidade de São Paulo,  
Caixa Postal 66318, 05389-970, São Paulo, SP, Brasil

<sup>(d)</sup> Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia,  
Caixa Postal 593, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil

*Palavras-Chave:* vidro, prata, fluorescência

Os estudos de vidros especiais têm recebido muita atenção nestas últimas décadas, devido a variados tipos de aplicações, por exemplo: concentradores solares luminescentes, fontes de lasers, filtros etc. Para tanto vem-se utilizando técnicas de absorção óptica, ressonância paramagnética eletrônica (RPE), fluorescência, entre outras. Estudos foram realizados com RPE e outras técnicas em vidros aluminoboratos contendo prata e irradiados com raios - X a 77K revelaram a presença de Ag<sup>0</sup> e Ag<sup>++</sup>, sendo que os íons Ag<sup>+</sup> em vidros atuam como armadilhas de elétrons e lacunas. Neste trabalho, utilizou-se a técnica de fluorescência com resolução temporal de nanossegundos para estudar o vidro 20Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 50B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> . 30BaO (mol %) contendo 5 at% adicionais de prata, levantando-se também os espectros de absorção óptica e emissão fluorescente. A referida amostra foi obtida em um forno de resistência elétrica no ar e utilizando um cadinho de platina. A amostra foi fatiada e polida adequadamente para obtenção de espectros fluorescência e de absorção óptica (AO). Os espectros foram obtidos à temperatura ambiente. As informações obtidas através de medidas de fluorescência dos centros não paramagnéticos Ag<sup>+</sup> das amostras não irradiadas são complementares às que foram obtidas por RPE do Ag<sup>0</sup> e Ag<sup>++</sup> das amostras irradiadas. Concluiu-se que são os centros de Ag<sup>+</sup> os responsáveis pela fluorescência, já que os centros Ag<sup>0</sup> e Ag<sup>++</sup> bem como Ag<sub>2</sub><sup>+</sup> estão ausentes no material não irradiado.

(CNPq/FINEP/FAPESP/FAPEMIG)

## VIDROS DE BAIXO PONTO DE AMOLECIMENTO (BPA) E BAIXO COEFICIENTE DE DILATAÇÃO (BCD)

Paião J.R.B. ; Watanabe S. ; IFUSP-USP

*Palavras -chave :* vidros,solda,espodumênio

A partir da década de 60 , com a descoberta dos vidros para laser e fibras ópticas , começaram a surgir os vidros com funções especiais , por isso chamados de new glasses, e com grande interesse industrial como no caso da solda elétrica , usando o espodumênio (LiAl<sub>3</sub>[Si<sub>2</sub>O<sub>6</sub>]) .O espodumênio -β de composição(Li<sub>2</sub>O-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-5Si<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)<sub>2</sub> é um vidro de baixo coeficiente de dilatação (9\* 10<sup>-7</sup> /°C) , entre ( 20°C e 1000°C ) , além de ser termo resistente .Por isso é usado como vidro de solda em circuitos eletroeletrônicos e blindagem .Foram fundidas amostras de espodumênio cristalino e com aditivos ( MgO-7%, TiO<sub>2</sub>-3,5%, Na<sub>2</sub>O-1% e CaO-2%). Nos dois casos a temperatura de fusão das amostras foram de aproximadamente 1400°C por duas horas . Para o primeiro foram efetuadas medidas de TL , as quais mostraram que o material fundido possui impurezas , e curvas de absorção óptica (AO) que mostraram ser o cristal rosa claro e o vidro amarelo claro. Através de técnicas de difração de raios-X concluímos a vitrificação desse cristal . Através de uma curva de dilatação térmica linear observamos um coeficiente de dilatação um tanto alto para as aplicações desejadas (214,5\*10<sup>-7</sup>/K ) e transição vítrea (tg ~ 488,7°C) . O vidro é ainda menos termoluminescente do que o cristal ou seja apresenta um menor número de picos TL, mostrando defeitos , que atuam como centros de TL , e que não aparecem no vidro devido a estrutura amorfa . Para a segunda amostra foram feitas as mesmas medidas e adicionadas as substâncias já citadas , para obter um (BCD) e um (BPA) para possibilitar a solda elétrica , o que a principio se mostrou eficiente , além ainda de medidas de AO em lâminas de vidro com doses de (10<sup>1</sup> , 10<sup>4</sup> , 10<sup>5</sup> , 10<sup>6</sup>) Gy.

RHAE-CNPq

## ESTUDO DA CRISTALIZAÇÃO DO VIDRO METÁLICO METGLAS 2605S-3A POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA

*Ronaldo Sergio de Biasi*  
Instituto Militar de Engenharia  
*Maria Lúcia Netto Grillo*  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro

*Palavras-Chave:* vidros metálicos, ressonância ferromagnética, cristalização

A estabilidade térmica dos 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  $Fe_{76}B_{16}Si_5Cr_2C_1$  (Metglas 2605S-3A), uma liga usada em transformadores de alta frequência, transformadores de corrente e circuitos de proteção contra sobrecargas. A largura de linha da curva de ressonância foi medida para vários tempos de tratamento isotérmico a 723, 733 e 743 K. A fração transformada, determinada a partir dos dados de RFM, segue a equação de Johnson-Mehl-Avrami com o expoente  $n$  igual a 1,04, resultado compatível com um processo de crescimento controlado por difusão com uma taxa de nucleação próxima de zero. A energia de ativação para cristalização,  $E_A$ , calculada a partir do tempo de tratamento necessário para que a largura de linha atinja três valores diferentes (60, 80 e 100 mT), é estimada em 359 kJ/mol, valor muito próximo do que foi medido anteriormente em uma liga de composição ligeiramente diferente, a Metglas 2605S-2 ( $Fe_{78}B_{13}Si_9$ ), para a qual  $E_A = 351$  kJ/mol. Por outro lado, o expoente de Avrami para esta última liga é igual a 1,92, quase duas vezes maior do que para a liga estudada no presente trabalho. Os resultados sugerem que a adição de cromo e/ou carbono à liga aumenta a taxa de nucleação.

(CNPq)

## COORDENAÇÃO E ESTADOS DE OXIDAÇÃO DO Fe EM VIDROS DE SILICATO

*J. H. de Araújo, J.A.P. da Costa, M.P. da Silva*  
Departamento de Física Teórica e Experimental, UFRN, Natal - RN

*R. Almeida, G.M. Gualberto.*  
Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência de Materiais.  
Instituto de Física, UNICAMP, Campinas -SP

*Palavras-Chave:* Vidros de Silicato, Efeito Mössbauer, Metais de Transição

Amostras de vidros de silicato dopados com  $Fe_2O_3$  (hematita) e  $FeS_2$  (pirita) foram caracterizados por Espectroscopia Mössbauer do  $^{57}Fe$ . Os espectros de todas as amostras foram ajustados com quatro dubletos relativos ao  $Fe^{2+}$  e ao  $Fe^{3+}$  nas coordenações tetraédrica e octaédrica. Os estados de oxidação do Fe bem como suas coordenações em função da concentração de  $FeS_2$  na matriz vítrea, são os fatores básicos que controlam suas propriedades óticas. As concentrações relativas destes quatro sítios foram determinadas do espectro Mössbauer, estabelecendo que, a quantidade relativa de  $Fe^{2+}$  aumenta com o decréscimo da concentração de  $FeS_2$ . Estes resultados estão de acordo com medidas de absorção ótica, indicando que 3% de Fe é a concentração ótima para uso do vidro como filtros de calor.

(CNPq)

## Glicerol superresfriado. Um estudo da dinâmica vítrea através da relaxação spin-rede do $^{13}\text{C}$ no referencial girante.

L.G. Mendes, I. C. de Souza, R. E. de Souza e M. Engelsberg  
Grupo de espectroscopia e imagens por RMN, Depto. de Física, UFPE

A transição vítrea é vista atualmente como um processo em duas etapas. A medida que aumenta a temperatura a estrutura vítrea fica menos rígida devido, em primeiro lugar, a um movimento atômico rápido mas muito localizado (processos  $\beta$ ) de amplitude crescente. Quando a temperatura atinge um valor suficientemente alto a estrutura é quebrada, o que permite a difusão atômica envolvendo distâncias grandes (processos  $\alpha$ ). O aparecimento do processo  $\alpha$  caracteriza a transição do comportamento vítreo para o de tipo líquido.

Resultados recentes<sup>(1)</sup> de RMN do  $^1\text{H}$  e de espalhamento de nêutrons em glicerol, sugerem que a temperaturas nas quais predominam os processos  $\beta$ , as amplitudes do movimento e as energias de ativação de dêuterons ligados ao carbono e de dêuterons ligados ao oxigênio são diferentes. A fim de caracterizar melhor o processo  $\beta$  no glicerol realizamos medições de RMN no núcleo de  $^{13}\text{C}$  numa amostra de glicerol 99% enriquecido e para minimizar os efeitos de difusão de spin utilizamos a relaxação no referencial girante.

Na faixa de temperatura  $150\text{ K} < T < 300\text{ K}$ , na qual foram realizadas nossas medições, podem ser observados os dois processos no glicerol. Os experimentos de "spin-locking" foram realizados usando amplitudes do campo girante B, entre 2 Gauss e 8 Gauss.

As medições de relaxação spin-rede no referencial girante são extremamente sensíveis a movimentos na escala de tempos que caracteriza os processos  $\beta$  e permitem correlacionar o movimento dos hidrogênios, já estudado anteriormente, com o movimento dos átomos de carbono. Com estes resultados é possível construir um modelo mais preciso do movimento atômico no glicerol no processo  $\beta$ .

Referência:

[1] F. Fujara, W. Petry, R.M. Diehl, W. Schnaus and H. Sillescu, *Europhys. Lett.*, 14, 563 (1991).

## RAMAN MICROPROBE STUDY OF MICROCRYSTALS IN BLAST-FURNACE SLAG GLASS-CERAMICS

*Ervin C. Ziemath* <sup>(a)</sup>, *Cátia Fredericci* <sup>(b)</sup>, *Edgar D. Zanotto* <sup>(b)</sup>

(a) Depto. Física, IGCE, UNESP, Rio Claro (SP); (b) DEMa, UFSCar, São Carlos (SP)

**Key words:** glass-ceramic, blast-furnace slag glass, Raman microprobe spectroscopy

Raman microprobe spectra measurements were performed on the spherulitic crystals grown in the bulk of a blast-furnace slag glass. The Raman spectra were analyzed together with DSC and X-ray diffraction measurements. The precursor glass was melted in platinum crucible and its main composition contains (in wt%): 35.8 SiO<sub>2</sub>, 11.8 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 43.5 CaO, and 6.21 MgO. Samples were thermally treated above  $T_g$  (635°C) and near the two DSC exothermic (crystallization) peaks (919 and 1012°C). The spectrum of the glass matrix presents a broad band at 880 cm<sup>-1</sup>. The spectra of the spherulite needles grown at 893°C during 2h present a narrow and weak band at 886 cm<sup>-1</sup>, which becomes narrower, sharper and stronger after 22 h, with shoulders at about 872 and 906 cm<sup>-1</sup>, and weaker and broader bands below 600 cm<sup>-1</sup>. According to the X-ray diffractogram, the needles have the structure of the merwinite crystal (3CaO-MgO-2SiO<sub>2</sub>), which was confirmed by the Raman spectrum and the X-ray diffractogram of a glass-ceramic obtained by crystallization of a glass with the merwinite composition. For longer treatment times and higher temperatures, the center of the spherulites undergoes a phase transformation, consistent with the DSC results. Raman spectrum of this new phase presents a very strong band at 912 cm<sup>-1</sup> and strong bands at 626, 662 and 858 cm<sup>-1</sup>. It indicates to be a superposition of the spectra of crystalline gehlenite (2CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>) and åkermanite (2CaO-MgO-2SiO<sub>2</sub>). The solid solution of these crystals forms the melilite phase, common in blast-furnace slag glasses devitrification.

(Financial support: CNPq, Grant No. 14.2870/92-7)

## RPE DE $\text{Cu}^{2+}$ , $\text{Gd}^{3+}$ E $\text{Mn}^{2+}$ EM FLUORITA VÍTREA

R. W. A. Franco<sup>1</sup>, J. P. Donoso<sup>1</sup>, C. J. Magon<sup>1</sup>, A. M. Ferraz<sup>1</sup>, Y. Messaddeq<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física - USP - São Carlos

<sup>2</sup>Instituto de Química - UNESP - Araraquara

*Palavras Chave:* RPE ; fluorita vítrea

Neste trabalho estudamos as propriedades de RPE do vidro  $40\text{InF}_3\text{-}20\text{ZnF}_2\text{-}20\text{SrF}_2\text{-}2\text{GaF}_3\text{-}2\text{NaF}\text{-}16\text{BaF}_2$  puro e dopado com  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Gd}^{3+}$  e  $\text{Mn}^{2+}$  nas concentrações de 50, 100 e 200 ppm. Comparamos os espectros das amostras submetidas a tratamentos térmicos nas temperaturas de transição vítrea ( $T_g=300^\circ\text{C}$ ) e de cristalização ( $T_c=400^\circ\text{C}$ ) e amostras não tratadas. O quarteto correspondente a estrutura hiperfina do  $\text{Cu}^{2+}$ , observado tanto na amostra não tratada quanto na amostra aquecida a  $T_g$ , não é observado após o aquecimento a  $T_c$ , sugerindo que o tratamento térmico resulta na oxidação deste ion, tornando-o diamagnético. As linhas em  $g=2,8$  e  $g=6,0$  associadas ao  $\text{Gd}^{3+}$  são menos intensas no espectro do vidro tratado a  $T_c$  que nos espectros da amostra não aquecida ou aquecida a  $T_g$ . Entretanto, a linha relacionada a ocupação deste ion em um sítio cúbico ( $g=2,0$ ) é intensificada. O espectro do  $\text{Mn}^{2+}$  apresenta um sexteto de linhas em  $g=2$  e outro sinal em  $g=4,3$ . Este último permanece inalterado após todos os tratamentos térmicos. Porém, as linhas do sexteto são intensificadas e estreitadas após aquecimento a  $T_c$ . Assim como os ions de  $\text{Gd}^{3+}$ , os ions de  $\text{Mn}^{2+}$  se posicionam em sítios com simetria mais definida após o tratamento térmico a  $T_c$ , indicando que se localizam em alguma das estruturas cristalinas formadas. Nos espectros de DRX dos vidros aquecidos a  $T_c$  foram observados picos característicos das estruturas de  $\text{InF}_3$ ,  $\text{Ba}_2\text{ZnF}_6$  e  $\alpha\text{-Ba}_2\text{In}_2\text{F}_{12}$ . Nos espectros de RPE do vidro puro e dos vidros dopados observamos que após o tratamento térmico a  $T_c$  surgem duas linhas superpostas na região em  $g=2$ . Estas linhas podem estar relacionadas a defeitos provocados durante o processo de cristalização.

## RELAXAÇÃO SPIN-NUCLEAR-REDE EM SISTEMAS VÍTREOS

Souza, I.C. de; Mendes, L.G.; Engelsberg, M.; Souza, R.E. de

Departamento de Física

Universidade Federal de Pernambuco

50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras chave:* RELAXAÇÃO ; RMN

Em RMN, a relaxação spin-nuclear-rede em sistemas amorfos tem sido bastante investigada, em particular a caracterização da transição vítrea em baixas temperaturas ( $T=T_g$ ) e os processos dinâmicos envolvendo ligações C-H ou O-H. Neste trabalho apresentamos resultados da relaxação spin-nuclear-rede, dos prótons, no referencial girante (experimento de "spin locking"), para as seguintes amostras: glicerol- $d_0$  e glicerol- $d_5$  (não deuterado e penta-deuterado). O glicerol é um sistema formador de vidros no qual as interações dominantes são as pontes de hidrogênio e foi estudado intensamente por meio de várias técnicas. O método que utilizamos para obtenção de resultados de relaxação no referencial girante, a técnica de "spin locking", é uma alternativa interessante para tais estudos, pois é mais sensível a movimentos lentos e o decaimento quando exponencial é analisado por um tempo designado por  $T_{1\rho}$ . Os dados obtidos com as duas amostras para temperaturas entre  $300\text{K}>T>150\text{K}$  apresentam, numa região restrita de temperatura, um decaimento não-exponencial que pode ser caracterizado como uma exponencial esticada. Os valores dos parâmetros  $\beta$  característico desta exponencial esticada  $\exp(-t/\tau)^\beta$  são comparados com os obtidos por outros métodos e os efeitos da transição vítrea na relaxação são discutidos. Observamos que a relaxação no referencial girante permite eliminar parcialmente os efeitos de difusão de spin na análise de resultados e comparar a ressonância do próton com a do deutério no referencial do laboratório que já havia sido estudada anteriormente<sup>(1)</sup>.

(1) W. Shnauss, F. Fujara, K. Hartmann and H. Sillescu, Chem. Phys. Letters, 166 (1990) 4.

## ESTUDO DE TRANSIÇÃO DE FASE CAULINITA-METACAULINITA ATRAVÉS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X EM TEMPERATURAS ELEVADAS

*Wilson Otto Gomes Batista<sup>1,2</sup>, Zbigniew Baran<sup>2</sup>, Dielson Pereira Hohenfeld<sup>2</sup>*

(1)- Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia; (2)-Instituto de Física - UFBA

*Palavras-chaves:* difração de raios-X, caulinita, transição de fase

Propomos uma técnica de difração de raios-X em temperaturas elevadas para estimar o índice de cristalinidade de Hinckley-HI (Hinckley D.N., 1963, Clays Clay Miner., 11, 229-235), em qualquer temperatura dentro da faixa 25-600°C. Usamos uma amostra de caulinita bem cristalizada proveniente da Amazonas. Os difratogramas foram obtidos com uma câmara Rigaku de alta temperatura, usando radiação CuK $\alpha$ . As seqüências de reflexões 02l, 11l e 13l, 20l, e as reflexões basais 001 e 002 foram analisadas. As reflexões 02l, 11l são bem definidas com boa resolução dos picos  $\bar{1}\bar{1}1$  e  $\bar{1}11$ . A importante característica observada foi o baixo "background" entre as reflexões 02l e 11l. O grau de desordem estrutural presente na caulinita foi avaliado através do índice HI em função da temperatura. Os dados obtidos mostram que HI cresce de 1.53 (25°C) para 1.64 (160°C) e depois mantém-se constante até 450°C. Com o aumento da temperatura os picos de difração desaparecem após 450°C. Assim no primeiro estágio de aquecimento (25-160°C) certos tipos de defeitos estruturais são provavelmente recozidos, após 160°C a estrutura mantém-se estável. A inspeção das reflexões basais 001 e 002 não revela qualquer mudança em posição, intensidade e largura do pico. Com aumento da temperatura após 450°C a posição dos picos permanecem inalteradas, contudo, é observado um decréscimo na intensidade em torno de 65% e em 510°C a reflexão 001 diminui para 20%. Em 600°C esta reflexão desaparece indicando o colapso da estrutura. Podemos concluir que a transformação da caulinita em metacaulinita inicia-se a partir de 450°C com a destruição da periodicidade da estrutura no plano das camadas (a,b), seguida pela dehidroxilação e remoção de OH da caulinita.

## RPE em HOPG intercalado com AlCl<sub>3</sub>: Fe<sup>3+</sup>

*E. N. de Oliveira\**

*M. A. Pires\**

*C. Rettori\*\*, G. E. Barberis\**

\* Departamento de Física - UFG - GO

\*\* Instituto de Física - UNICAMP - SP

*Palavras-Chaves:* RPE, grafite intercalado, transição de fase

Experimentos de Ressonância Paramagnética Eletrônica dos portadores de cargas (RSPC) em monocristais de Grafite Piroclítico Altamente Orientado (HOPG) e seus compostos intercalados tem sido usados para o estudo de várias propriedades destes materiais altamente anisotrópicos.

Neste trabalho várias amostras de HOPG foram intercaladas com AlCl<sub>3</sub>:Fe<sup>3+</sup> utilizando-se a técnica de intercalação por duas zonas de vapor. As amostras foram preparadas tomando-se a concentração de ferro, no material intercalante, variando entre 2% e 10%. Os experimentos de RPE tem revelado que a largura da linha de ressonância aumenta com o aumento da concentração de ferro na amostra mas não se distingue duas linhas separadamente (grafite e ferro).

Por simplicidade a forma da linha foi analisada em termos da teoria de Dayson e os valores de g obtidos para as orientações Ho//C e Ho $\perp$ C se mostraram ligeiramente anisotrópicos. A largura de linha mostra a ausência de anisotropia para frequência de modulação na região em torno de 1 KHz.

Experimentos em função da temperatura foram realizados para T variando entre 100 K e 300 K, utilizando um controlador de fluxo de nitrogênio acoplado à cavidade de ressonância. Em algumas amostras observamos anomalias na largura de linha, manifestada pelo alargamento brusco da linha numa temperatura em torno de 200 K. Estas anomalias são interpretadas em termos de uma transição de fase tipo ordem - desordem experimentada por moléculas intercalantes, nesta temperatura.

## HIGH TEMPERATURE BEHAVIOR OF HAFNIATES AND RUTHENATES: X-RAY DIFFRACTION AND PAC SPECTROSCOPY

*J.A. Guevara, S.L. Cuffini and Y.P. Mascarenhas.*

Instituto de Física de São Carlos, USP, CP 369, CEP 13560-970, São Carlos, SP, Brazil.

*P. de la Presa, A. Ayala and A. Lopez Garcia.*

Depto de Química, Universidad Nacional de La Plata, 1900, La Plata Argentina.

**Key words:** structure, ceramics, ruthenates

Recently ruthenate compounds are being used as substrates for the growth of High-Tc superconductors because of their structural and electrical properties (Science, Vol.258 1766, 1992 - Appl.Phys.Lett., 62(2) 1993). Although the SrRuO<sub>3</sub> (SR) SrHfO<sub>3</sub> (SH), BaHfO<sub>3</sub> (BH) and CaHfO<sub>3</sub> (CH) as other perovskites oxides, have been known for well over 30 years, their crystal structures are still not well established. In the case of SR, some reports assigned a cubic symmetry with space group, P-3m (Solid State Ion. 43, 171 (1990)) and the other one reported an orthorhombic symmetry, Pnma (Acta Cryst. (1989) C45, 365 - Physica C 252 (1995) 303). SH, BH and CH have been less studied and the latest report for SH was in 1935 assigned a cubic symmetry (Pm3m) (Z. Phys.Chem. 28, 74 (1935)). In order to study the structures at room temperature and their behavior until higher temperatures, X-ray diffraction and PAC spectroscopy data were collected from room temperature up to 1000° C. The structures were refined by the Rietveld Method using the DBWS9411 program. The refinements of X-ray diffraction patterns indicate that SR and SH, have an orthorhombic Pnma symmetry at room temperature. The lattice parameters are a=5.535(5)Å, b=7.845(1)Å, c=5.569(3)Å and a=5.7834(2)Å, b=8.1673(1)Å, c=5.7737(1)Å for SR and SH respectively. Changes of structural parameters with temperature such as unit cell dimensions, atomic positions, interatomic distances and angles, octahedral tilting, etc. were calculated for all compounds. The structure analysis and PAC spectroscopy measurements of SR and SH compounds show that below 700° C the structure has lower-than-cubic symmetry, most likely orthorhombic one. The comparison of structure parameters reveals that O-octahedral arrayments, RuO<sub>6</sub> are more tilted than HfO<sub>6</sub>, however both compounds present the phase transition (orthorhombic - cubic symmetry) around 700°C. BH and CH have a cubic and an orthorhombic symmetry respectively and no structural phase transition was observed up to 1000 °C.

(FAPESP, CAPES, FINEP, CNPq)

## TRANSIÇÕES DE FASE EM CRISTAIS DE PERCLORATO DE TETRAMETILAMÔNIA - N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub>

*Carlos B. Pinheiro; Alexandre M. Moreira & Nivaldo L. Speziali*

Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas

Universidade Federal de Minas Gerais

**Palavras-chave:** transições de fase, modulação, estruturas cristalinas

A presença de estrutura modulada em cristais tem sido observada numa variedade muito grande de compostos. O grupo dos A<sub>2</sub>BX<sub>4</sub> é um dos mais estudados do ponto de vista da ocorrência de transições de fase que levam o cristal a uma fase modulada. Nesse grupo a diversidade de composição é enorme, encontrando-se cristais com apenas três tipos de átomos como o Cs<sub>2</sub>HgBr<sub>4</sub> e outros mais complexos como o [N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]<sub>2</sub>ZnCl<sub>4</sub>.

Compostos com estequiometria semelhante aos A<sub>2</sub>BX<sub>4</sub> têm sido investigados na expectativa da descoberta de novos cristais com estrutura modulada. Nesse sentido temos trabalhado na síntese e crescimento de cristais de compostos do tipo N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>XO<sub>4</sub> onde X=Cl, Br, I.

Amostras monocristalinas de N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub> foram obtidas por métodos de evaporação simples e por convecção em solução super saturada. Medidas de Calorimetria Diferencial de Varredura (DSC) mostraram duas transições de fase entre as temperaturas ambiente e 120K. A forma dos picos do DSC indicam uma sequência de transições do mesmo tipo da encontrada em cristais A<sub>2</sub>BX<sub>4</sub> o que é um indicativo da possibilidade de existência demodulação em uma das fases.

Medidas de difração de raios X na técnica de precessão evidenciam que, na temperatura ambiente, os cristais de N(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub> têm simetria tetragonal. As fotos de precessão inosiraram a presença de algumas reflexões satélites em direções especiais do espaço recíproco indicando a possibilidade de se tratar de um cristal modulado. Medidas complementares estão em andamento com o objetivo de se estudar a estrutura do cristal e esclarecer o significado das reflexões satélites.

(CNPq, FAPEMIG)

## EVOLUÇÃO TÉRMICA DA METACAULINITA ENTRE 900-1400°C

*Dielson P. Hohenfeld<sup>2</sup>, Wilson Otto G. Batista<sup>1</sup>, Zbigniew Baran<sup>2</sup>, Iuri M. Pêpe<sup>2</sup>*

(1)-Centro de Educação Tecnológica da Bahia;(2)-Instituto de Física-UFBA

*Palavras-chave:* difração de raios-x, Caulinita, metacaulinita

As caulinitas são silicatos laminares com fórmula estrutural  $2[\text{Si}_2\text{Al}_2\text{O}_5(\text{OH})_4]$ , e possui estrutura triperiódica triclinica. Esta estrutura quando aquecida a 500°C desidrata-se provocando desta forma um colapso da estrutura, o que significa a perda da sua periodicidade na direção  $c$ . Surge então uma nova fase chamada metacaulinita, onde não podemos observar nenhuma reflexão pela difração de raios-X, sendo assim considerado um sólido amorfo. O tratamento térmico para temperaturas superiores a de colapso, conduz em alguns casos a formação de novos minerais:  $\gamma$ -alumina, cristobalita e mulita. Embora o aparecimento destes novos minerais não seja novidade, muitas dúvidas existem sobre a formação da  $\gamma$ -alumina e sua relação com o grau de cristalinidade da caulinita original. Analisando duas caulinitas brasileiras com diferentes graus de cristalinidade, através da técnica de difratometria de pó em altas temperaturas, notamos que, para a caulinita bem cristalizada (Manaus-Am), o espectro a partir de 1000 °C revela a presença de uma fase cristalina bem definida, a mulita. Enquanto que na outra caulinita, mal cristalizada (Beribeira-Ba), observa-se crescimento de uma fase cristalina, a  $\gamma$ -alumina. Podemos estabelecer uma relação entre o crescimento de novas fases cristalinas com o grau de cristalinidade do material original.

( CNPq)

## IRON-NITRIDE PHASE TRANSFORMATION INDUCED BY SIMULTANEOUS Ar BOMBARDMENT AND THERMAL ANNEALING

*E.C. Moreira<sup>a</sup>, C.E. Foerster<sup>b</sup>, L. Amaral<sup>a</sup> and M. Behar<sup>a</sup>*

<sup>a</sup> Instituto de Física, UFRGS, Caixa postal 15051, 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

<sup>b</sup> Departamento de Física,UEPG, 84031-510, Ponta Grossa, Brasil

*Palavras Chave:* Fe-nitrides, Mössbauer spectroscopy, argon irradiation

In this contribution we describe the study performed on Fe-N phase transformations induced by the concomitant effect of ion beam irradiation and relatively low annealing temperatures. It is known that high fluence, low energy N implantation in Fe produces the direct formation of  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N precipitates. This phase has shown to be very stable under both: ion irradiation and thermal annealing. Room temperature noble gas ion irradiation merely induces a partial  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N  $\Rightarrow$   $\epsilon$ -Fe<sub>2-x</sub>N transformation. On the other side, only when thermal annealings are performed at temperatures higher than 300°C they induce an  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N  $\Rightarrow$   $\epsilon$ -Fe<sub>3,2</sub>N phase transformation. In the present work we report the CEMS ( Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy ) results of a set of experiments, where we have studied the Fe-N phase transformations produced by the simultaneous use of ion bombardment and temperature. Fe samples were room temperature N implanted at 50 keV with a fluence  $\phi = 4 \times 10^{17}$  at/cm<sup>2</sup> and bombarded with a 300 keV Ar beam, being the samples maintained at temperatures between 200 and 350°C and currents in the range 0.5 and 2.0  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$ . It was studied the threshold of these parameter in order to produce a complete transformation  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N  $\Rightarrow$   $\epsilon$ -Fe<sub>3,2</sub>N. After 40 minutes of irradiation at 250°C it was observed an complete  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N  $\Rightarrow$   $\epsilon$ -Fe<sub>3,2</sub>N phase transformation. In addition similar bombardments performed at 300°C induce an  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>N  $\Rightarrow$   $\epsilon$ -Fe<sub>3,2</sub>N +  $\gamma'$ -Fe<sub>4</sub>N phase transformation. These temperatures are 50°C lower than the ones needed to produce the same transformation by single thermal annealings. Additional experiments show that the above mentioned transformations start after 15 minutes of irradiation and are completed after 40 minutes of ion bombardment. Further irradiations do not bring more significative changes.

( CNPq )

## FOTOREFLETÂNCIA EM SUPER REDES DELTA DOPADAS

*Dione Fagundes de Sousa, Maria José V. Bell e L. A. O. Nunes*

Departamento de Física e Informática, IFSC, USP

*Palavras-Chave:* fotorefletância, delta doping, Franz-Keldysh

Fotorefletância modulada é uma técnica espectroscópica sem contato para o estudo de estrutura de bandas de semicondutores e superfícies sólidas. Através da técnica de fotorefletância é possível deduzir o campo elétrico na região entre a superfície da amostra e a camada delta dopada. Observamos em nossos espectros dois conjuntos de oscilações Franz-Keldysh (lentas e rápidas) indicando a presença de campos elétricos em outras regiões e não só na superfície das amostras. Conseguimos separar as oscilações rápidas e lentas através de um ajuste na fase do lock-in e verificamos que as oscilações lentas correspondem ao campo elétrico da superfície e as oscilações rápidas a um campo que pode ter sua origem na interface super rede / buffer. Através dos pontos críticos das oscilações Franz-Keldysh podemos extrair o campo elétrico devido às mesmas, o campo elétrico da superfície pode ser calculado aproximadamente pela expressão do campo de um capacitor paralelo  $E = V/L$ , onde  $V$  é o "pinning" do nível de Fermi e  $L$  é a distância entre a primeira camada delta dopada e a superfície, o campo da interface super rede / substrato é dado por  $E = V_b / W$ , onde  $W$  é a largura da camada de depleção formada na interface e  $V_b$  é a altura da barreira de potencial. Os campos obtidos pelas oscilações Franz-Keldysh e os calculados pelas expressões acima estão em bom acordo. Estudamos o comportamento de ambos os campos em função da temperatura e da intensidade do feixe de prova e observamos que apenas as oscilações rápidas apresentam forte dependência com a intensidade do feixe de prova, isto pode ser explicado pelo fato de que campos mais baixos (oscilações rápidas) são mais facilmente influenciados pelo efeito fotovoltaico, o efeito fotovoltaico foi observado para os campos mais altos (oscilações lentas) ao baixarmos a temperatura das amostras.

(CNPQ, FAPESP)

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA PARA CARACTERÍSTICAS DE CAPACITÂNCIA-VOLTAGEM DE GATE DE HEMT

*José Eduardo Manzoli*

*Ciência e Engenharia de Materiais - São Carlos - USP*

*Oscar Hipólito*

*Departamento de Física e Ciência dos Materiais - IFSC - USP*

*Palavras-chave:* hemt, capacitância, auto-consistência

O Transistor de Alta Mobilidade Eletrônica (HEMT) é um dos mais promissores candidatos para uso em Circuitos Integrados de Muito Alta Velocidade (VHSICs) devido à sua altíssima velocidade de chaveamento, consumo de potência muito baixo e tecnologia de fabricação relativamente simples. Nesse trabalho nós apresentamos uma simulação numérica, incluindo efeitos de correlação e troca, para características de capacitância-voltagem de AlGaAs/GaAs HEMT ou MODFET (MODulation-Doped heterojunction Field-Effect Transistor). Nós usamos o método de propagação do Split-Operator para resolver auto-consistentemente as equações de Poisson e Schrödinger, levando em conta a diferença de massa efetiva eletrônica e constante dielétrica dos materiais, para obter a densidade de carga, sub-bandas e o perfil do potencial efetivo como função da voltagem de gate à 77 e 300K. A precisão dos resultados numéricos para a capacitância DC é comprovada pela comparação com medidas experimentais, mostrando uma boa concordância. Muitos parâmetros de crescimento usados na simulação podem ser facilmente alterados a fim de otimizar o dispositivo. A maior vantagem deste método de cálculo, além de usar exclusivamente parâmetros tecnológicos como dados de entrada, é que nós podemos usar o mesmo procedimento para investigar diferentes heteroestruturas.

(FAPESP, Centro Nacional de Supercomputação - UFRGS)

## MAGNETOOSCILLATIONS IN A TRAPEZOIDAL TWO-DIMENSIONAL ELECTRON GAS GROWN OVER GaAs WIRES.

N. La Scala Jr.<sup>1</sup>, G.M. Gusev<sup>1</sup>, D.I. Lubyshev<sup>1</sup>, P.P. González-Borrero<sup>1</sup>,  
M.A.P. da Silva<sup>1</sup>, J.C. Rossi<sup>2</sup>, P. Basmaji<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos, 13560-970, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

<sup>2</sup>Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brazil

**Keywords :** quantum wires, Shubnikov de Haas oscillations

In the present work we realized a non planar structure containing a two-dimensional electron gas (2DEG) for studying the behaviour of electrons at random and sign alternating magnetic field. Samples were fabricated employing overgrowth of GaAs and AlGaAs materials by molecular beam epitaxy on pre-patterned GaAs substrate. The pre-patterning is consisted of wires produced by electron beam lithography at the center of a conventional Hall bar. After selective deep wet etching, several wires with trapezoidal shape (diameter 0.5-1  $\mu\text{m}$  and length 10  $\mu\text{m}$ ) were created. Since the 2D electrons are sensitive only to the normal component of B, they will move in an positive or negative magnetic field, depending on their position on trapezoidal planes and the angle between magnetic field and substrate  $\phi$ . In magnetic field perpendicular to the substrate plane, large positive magnetoresistance and Shubnikov oscillations have been observed. The effects on the Shubnikov oscillations, by changing of a specific realization of an inhomogeneous magnetic field, were studied by measuring the magnetoresistance for different angles  $\phi$ . We found that at low magnetic field, positions of Shubnikov oscillation peaks follow  $B_p \sim B \sin(\phi - \theta)$ , where  $\theta$  is the angle of plane ( $\sim 15^\circ$ ) containing electrons, which contribute to the magnetoresistance. At strong magnetic field, oscillations change the phase and exhibit additional structure, which are originated from complexity of the magnetotransport in the inhomogeneous field.

(CNPq and FAPESP)

## ELECTRON HEATING EFFECTS IN A FREE STANDING WIRE OBSERVED BY UNIVERSAL CONDUCTANCE FLUCTUATIONS

N. La Scala Jr.<sup>1</sup>, G.M. Gusev<sup>1</sup>, D.I. Lubyshev<sup>1</sup>, P.P. González-Borrero<sup>1</sup>, J.C. Rossi<sup>2</sup>,  
M.A.P. da Silva<sup>1</sup>, D.K. Maude<sup>3</sup>, J.C. Portal<sup>3</sup>, P. Basmaji<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos, 13560-970, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

<sup>2</sup>Universidade Federal de São Carlos, Brazil

<sup>3</sup>CNRS-LCMI, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

**Keywords:** Free standing wires, electron interference

In this work we have employed intentionally a series of free standing wires for studying the effect of a DC current in Universal Conductance Fluctuations. Free standing wires offers the possibility of studying local heating up effects on the electron interference due to the increase of temperature at centre of the wire. The structure was preliminary created by growing a two dimensional electron gas in a GaAs/AlGaAs heterostructure. Devices were fabricated at centre of a Hall bar using electronic lithography and deep wet etching. Several free standing wires were produced with length 1-10  $\mu\text{m}$  and width 0.5-1  $\mu\text{m}$ . Measurements were performed at temperatures of sample  $T_s$  down to 50 mK and magnetic fields up to 10 Tesla. We have done a set of experiments where DC injected current  $I_{DC}$  was added to AC locked one. Universal Conductance Fluctuations were measured as function of magnetic field,  $T_s$  and  $I_{DC}$ . It is possible to extract the local region where heating up is more effective. Results sign the possibility of using injection current across wires to change impurity configuration specifically at centre of such devices, due to localised heating up effects.

(FAPESP, CNPq and COFECUB)

## PHOTOLUMINESCENCE STUDY OF RADIATIVE RECOMBINATION ON GaAs/GaAlAs $\delta$ -DOPING QUANTUM WELLS

<sup>(\*)</sup>N. O. Dantas, <sup>(#)</sup>A. Tabata, <sup>(#)</sup>S. Martini, <sup>(#)</sup>A. Marti Ceschin, <sup>(#)</sup>L.M.R. Scalfaro, <sup>(#)</sup>R. Enderlain, and <sup>(#)</sup>J. R. Leite

<sup>(\*)</sup>Departamento de Ciências Físicas, Universidade Federal de Uberlândia, MG, Brazil

<sup>(#)</sup>Instituto de Física, Universidade de São Paulo, S.P. Brazil

**Palavras-chave:** Photoluminescence,  $\delta$ -doping, quantum well

In this work, we present photoluminescence (PL) temperature dependence results on a series of AlGaAs/GaAs  $\delta$ -doping quantum wells ( $\delta$ -QW), in order to better understand the subband structure of this particular system. The samples were grown in our laboratory by MBE, with well thickness varying from 50 to 300Å. The doping sheet was placed in the centre of the well with nominal concentration of  $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . At low temperature (1.4K) the PL spectrum of these samples is dominated by the tridimensional near band gap (NBG) GaAs emission. However, as the temperature is raised carriers are easier trapped in the wells, resulting in an increase of emissions associated to the  $\delta$ -QW. At 30K these emissions are practically the dominant. After this temperature the NBG-GaAs emission becomes again the more intense, due to the thermal activation of carrier from the well. The associated  $\delta$ -QW emission moves to low energy as the well thickness increase, as a result of the quantum confinement effects. Normally, at low temperature, this emission is broad with a high energy cut off, associated to the Fermi level. Increasing the temperature holes are no more localised. These prevent transitions up to the Fermi level and the emission becomes symmetric with the pick associated to the critical points of the valence and conduction bands. Due to the triangular forms of the potential caused to the  $\delta$ -doping, not only the fundamental, but also some excited states can participate on the PL process. In our samples, at least two electronic levels were detected. In all samples transitions below the NBG GaAs emission were observed. These were ascribed to emissions associate to the levels in the triangular part of the QW.

(CAPES, FAPESP, CNPq, FAPEMIG)

## LARGURA DOS PICOS DE ABSORÇÃO EM PONTOS QUÂNTICOS DE CdTe EM VIDROS DOPADOS

Walter A. A. Espinoza, C. L. Cesar, L. C. Barbosa e Ana M. de Paula

Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas SP.

**Palavras-Chave:** absorção óptica, largura de linha, pontos quânticos

Nos últimos anos cresceu bastante o interesse por estudos dos níveis de energia devido à efeitos de confinamento quântico em nanocristais (pontos quânticos) de semicondutores em vidros dopados, principalmente pela potencialidade desses materiais para aplicações tecnológicas. Devido aos processos intrínsecos da preparação destes vidros dopados os nanocristais apresentam uma distribuição de tamanho, e consequentemente os espectros de fotoluminescência e absorção apresentem picos com alargamento não-homogêneo grande. Neste trabalho apresentamos medidas em função da temperatura da amostra e estudamos os efeitos de alargamentos homogêneo e não-homogêneo nos picos de absorção óptica. Estudamos várias amostras com pontos quânticos de CdTe crescidas com tempos de tratamento térmicos diferentes, isto é, amostras com raios médios e distribuições de tamanhos diferentes. As amostras foram preparadas fazendo a fusão dos componentes da matriz vítrea  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$  e  $\text{ZnO}$  com os dopantes  $\text{CdO}$  e telúrio metálico. Os nanocristais de CdTe são produzidos por tratamento térmico. Comparando os espectros de absorção à baixa temperatura com os espectros à temperatura ambiente, observamos que à baixa temperatura os picos de absorção são mais finos e mais intensos. Isto indica que para temperatura ambiente o alargamento homogêneo é maior do que alargamento devido a distribuição de raios dos pontos quânticos. Os espectros à baixa temperatura foram ajustados considerando uma distribuição de raios gaussiana e os níveis de energia obtidos através de uma aproximação k-p.

## **EFEITOS DE CORRELAÇÃO, TROCA E SUB-BANDAS NAS EXCITAÇÕES DE PLASMONS EM FIOS DE POÇOS QUÂNTICOS RETANGULARES DE BARREIRA FINITA.**

*Paulo C. M. Machado e Francisco A. P. Osório - Universidade Federal de Goiás*

*Antônio Newton Borges - Universidade Federal de Goiás e Universidade Católica de Goiás*

**Palavras-Chave:** Fio quântico, Semicondutores, Plasmons

Os efeitos das correlações de curto alcance em fios quânticos têm sido estudados usualmente considerando o confinamento do gás de elétrons por uma barreira de potencial infinita. Neste trabalho consideramos um caso mais real que é o confinamento do gás de elétrons por uma barreira finita. Investigamos a função resposta de um gás de elétrons quase unidimensional, dentro da teoria STLS generalizada [1], utilizando o modelo de três sub-bandas com somente uma sub-banda ocupada. Consideramos um fio quântico retangular de GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. O movimento eletrônico é quase livre ao longo do comprimento do fio, direção  $x$ , e confinado por um poço de potencial de altura finita no plano  $(y,z)$ . Entretanto, como os níveis de energia são bem espaçados na direção  $z$ , assumiremos que não ocorrem transições intersub-bandas nessa direção; sendo assim, consideramos nula a espessura do fio nessa direção. Calculamos as excitações de plasmons  $\hbar\omega_p(q)$ , o fator de estrutura  $S(q)$ , o potencial efetivo  $\Psi(q)$  e a função de correlação dos pares  $g(x)$  em função da altura da barreira de potencial e comparamos com os resultados obtidos com a aproximação RPA. Verificamos, para um fio quântico de 300 Å de largura e para o nível fundamental, que os resultados obtidos com a teoria STLS são praticamente insensíveis à variações da altura da barreira e que para os níveis excitados há diferenças significativas.

[1] Borges, A. N.; Degani, M. H. e Hipólito, O. Superlatt. Microstruct. **13**, 1993.

**Steady-state photoluminescence of GaAs-(Ga, Al)As quantum-well wires**

*S. T. Pérez-Merchancano, M. de Dios-Leyva\*, and L. E. Oliveira*

**Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, C. P. 6165**

**Campinas, São Paulo, 13083-970, Brazil**

**\*Permanent address: Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, Cuba**

In the recent years low-dimensional semiconductor structures such as wells (QW), wires (QWW), and quantum dots (QD) have attracted great interest, due to their promising application potential in electronics and photoelectronic devices and also because their physical properties. Due to the spatial confinement of carriers a wide variety of physical properties can be controlled via the sizes of the structures. This form recombination processes in these systems have been the subject of worldwide theoretical and experimental research for several decades. We work within the mass-effective approximation and the parabolic-band model for describing both electrons and holes. From the very beginning these efforts have been motivated by the importance of a quantitative understanding of recombination processes. We have investigated the dependence on the continuous-wave laser intensity of the steady-state photoluminescence of GaAs-(Ga,Al)As QWW, which is affected by trap saturation. In order to examine the trap saturation in a more sensitive scale, we have also calculated the dependence of the effective nonradiative decay time on the laser intensity. In addition, the laser intensity dependences of the trapping efficiency and of the ratio of the electron and hole nonradiative decay times have been determined for different ratios of the trapping at room temperature and 5 nm of radii. This results are compared with the obtained by Ding et al [J. Appl. Phys, **75** (3) 1994] which calculated these processes in multiple quantum-wells of GaAs-(Ga,Al)As. We have obtained the carrier densities, quasi-Fermi-levels and different lifetimes in function of c-w laser-intensity including effects of shallow and trap densities. This results are compared with the obtained by S. T. Pérez-Merchancano et al [Phys. Rev. B (in press)] which calculated these processes only with shallow impurities in QWW.

(CNPq, CAPES and FAPESP)

## Roughness on the vertical transport properties of semiconductor superlattices

F. Aristone<sup>1</sup>, J.F. Palmier<sup>2</sup>, P. Gassot<sup>3</sup>, J.C. Portal<sup>3</sup> and J.C. Harmand<sup>2</sup>

1) UFSCar, C.P. 676, 13565-905 São Carlos - SP, Brasil

2) CNET/France Telecom/PaB/Bag, B.P. 107, 92225 Bagneux Cedex, France

3) LCMi-CNRS, B.P. 166, 38042 Grenoble Cedex 9, France

We investigated the interface fluctuations of semiconductor superlattices using a magneto-transport experiment. The anisotropy of roughness scattering was associated to island elongated in the (110) direction. Such effect was also studied as function of different periods. Effects of the nonparabolic energy in the plane of the layers have been observed in the limit of high electric field polarization.

The vertical transport properties of *GaAs-AlAs* superlattices have been studied in presence of a high magnetic field applied in the plane of the layers. The crossed field configuration induced an in-plane motion of the carriers. Rotating the sample into the insert we were able to measure the current intensity as function of the magnetic field orientation in this non-conventional Hall configuration. A single modulation of the vertical current, with a period equal  $180^\circ$ , was observed. Such modulation has been associated to the interface fluctuations, which is non-isotropic. We demonstrated that interface fluctuations cannot be neglected even at room temperature, when scattering by optical phonons are predominant. It has been shown that the amplitude of such modulation is dependent on the well width.

It is well known that these superlattices present the Negative Differential Conductance for high enough bias voltage. In the non-linear (high electric field limit) regime of transport a double modulation of the current intensity was observed, with a period of  $90^\circ$ . In order to explain such double modulation we solved the Boltzmann transport equation taking into account the nonparabolic electronic energy dispersion in the plane of the layers. We have shown that a simple model, taking into account the bulk *GaAs* parameters, qualitatively explains our observations.

## DISORDER EFFECTS ON TUNNELING THROUGH ONE-DIMENSIONAL DOUBLE-BARRIER QUANTUM WELLS

*R. Rey-Gonzalez and P. A. Schulz*

Departamento de Física do Estado Sólido e Ciências dos Materiais, Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP

*Key words:* disordered, localization, quantum confinement

Disordered one dimensional systems, exhibiting nontrivial extended states have been a subject of great interest in the past few years. One dimensional finite systems showing clear mobility edges open a useful scenario to understand some fundamental questions related to the existence or not of quantum confinement in strongly disordered heterostructures, like quantum wells made of amorphous semiconductors. The research efforts devoted to heterostructures based on amorphous semiconductors have not yet established a clear picture of the related quantum size effects in this context. On the other hand, attempts to produce heterostructures of polymeric materials have been reported in the literature, opening a new branch in the field of low dimensional systems. Here we study the electronic structure of quantum wells, where the well material is a repulsive binary alloy, described by a tight-binding model. Although heuristic, such model represents an important step in understanding quantum well structures based on amorphous semiconductors or the new proposed polymeric structures. We find bona fide confined states in the energy range where the bulk material presents states with a localization length at least three times longer than the quantum well width. These bona fide quantized states show clear parity properties in spite of the disorder. These results due to the competition between localization length and quantum effects, are also verified in the transmission probability of these double barrier structures. Some clear transmission resonances related to bona fide quasi-bond states are identified. We also extend this model to analyze the formation of some minibands in disordered multi-quantum wells systems.

(CNPq)

## Estrutura eletrônica de "fios quânticos" gerados por distribuição de carga espacial.

*Alexandre Marletta e Lidério Ioriatti*

Departamento de Física e Informática, IFSC, USP

*Palavras-Chave:* estrutura eletrônica, fios quânticos, Thomas-Fermi.

Avanços nas modernas técnicas de crescimento Epitaxial por Feixes Moleculares (MBE), tornaram possível a incorporação de dopantes rasos em semicondutores. A situação particular onde essa incorporação é feita em planos atômicos bem definidos do material hospedeiro (dopagem planar abrupta) tem o efeito de quantificar o movimento eletrônico na forma de sub - bandas elétricas, devido ao potencial auto - consistente gerado pela blindagem de impurezas ionizadas. Estudos experimentais, que combinam o crescimento epitaxial em planos vicinais (terraços) com aquelas associadas a dopagem planar abrupta, tem sido feitas com o propósito de obter - se sistemas de baixa dimensionalidade, como os sistemas unidimensionais na forma de "fios quânticos". Neste sistema a deposição epitaxial é feita a partir de terraços criados na face (100) de cristais de GaAs, sugerindo que a incorporação de dopantes ocorrem preferencialmente nos degraus que delimitam os planos vicinais, formando assim "fios quânticos". Portanto, o conhecimento das propriedades eletrônicas deste tipo de sistema é de grande interesse do ponto de vista tecnológico e fundamental. Resultados teóricos recentes, sugerem que a aproximação semiclássica de Thomas - Fermi é capaz de reproduzir quantitativamente o potencial auto - consistente e a densidade eletrônica, em função da temperatura, destes sistemas eletrônicos. Pensando neste problema que neste trabalho, apresentamos o calculo teórico do potencial auto - consistente e a densidade eletrônica, em função da temperatura, através da aproximação semiclássica de Thomas - Fermi para este sistema. Além deste calculo, apresentamos os resultados teóricos do calculo auto - consistente da estrutura eletrônica utilizando o formalismo do funcional densidade (TFD) para estado fundamental do sistema.

(CNPq)

## EXCITAÇÕES COLETIVAS EM FIOS QUÂNTICOS RETANGULARES DE BARREIRA FINITA, LEVANDO EM CONSIDERAÇÃO O MODELO DE MULTISUB-BANDAS.

*Paulo C. M. Machado e Francisco A. P. Osório - Universidade Federal de Goiás*

*Antônio Newton Borges - Universidade Federal de Goiás e Universidade Católica de Goiás*

*Palavras-Chave:* Fios quânticos, Semicondutores, Blindagem

Estudamos o gás de elétrons unidimensional contido em um fio quântico retangular de GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Consideramos um modelo no qual os elétrons têm seus movimentos restritos ao plano  $z = 0$ , com seus movimentos quase livres na direção  $x$  e confinados na direção  $y$  por um poço de potencial quadrado ( $0 < y < L$ ) de barreira finita, o que não é usual na literatura, já que normalmente trabalha-se com confinamento com barreira infinita. Utilizamos um modelo de multisub-bandas. Obtivemos as funções de onda dos elétrons confinados no fio quântico quase-unidimensional com altura da barreira de potencial finita e os fatores de forma intrasub-banda  $f_{0000}$  e intersub-bandas  $f_{1010}$  e  $f_{2020}$  para um fio quântico de largura 300 Å, variando a altura da barreira de potencial, e comparamos com os resultados obtidos considerando a altura da barreira de potencial como infinita [1]. Estudamos também como o fator de forma intrasub-banda  $f_{0000}$  varia com a largura do poço nos limites de grandes ( $L \approx 1000$  Å) e pequenas larguras ( $L \rightarrow 0$ ). Verificamos, nesses casos, que para poços largos a influência da altura da barreira de potencial é pequena e diminui à medida que a largura cresce e que, à medida que o poço se estreita, o fator de forma cresce com a diminuição de  $L$ , até atingir um valor máximo e depois decresce bruscamente, como esperado para o modelo de barreiras finitas.

[1] Wendler, L.; Haupt, R. and Grigoryan, V. G. Phys. Stat. Sol. (b) 149, K123 (1988)

## THE DOUBLE BARRIER COHERENT SOUND GENERATOR (SASER): A STUDY OF THE DYNAMICAL BEHAVIOR

*José Weberszpil, Sergio S. Makler, Enrique V. Anda and Mikhail I. Vasilevskiy\**

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niteroi-RJ, Brazil

\* Faculty of Applied Physics, N. Novgorod University, Nizhni Novgorod, Russia

*Palavras-Chave: barrier, dynamical, heterostructure*

In this work we study an ultra high-frequency coherent sound generator, consisting of a double barrier heterostructure (DBHS) under the effect of an external bias, designed in order to make the LO-phonon field to resonate with the two lower electron levels at the well. To describe the electron and phonon population dynamics, the electric current and the phonon beam intensity, a system of non-linear kinetic equations were selfconsistently solved.

In the first part of this work we extensively study the behavior of the steady state solution obtained iteratively. For a wide region of applied bias the system has a regular behavior. However, at the beginning of the phonon emission there is a region of instability where there are more than one solution present as a function of  $V$  and depending on other parameters like the degree of asymmetry and the position of the Fermi level. The second part is devoted to study the temporal dynamics of currents and populations. By solving numerically the kinetic equations, we found an exponential convergence to a stationary solution, except for the region of instability already mentioned, where the solutions have oscillations without temporal damping. We have observed that inside this region, an infinitesimal perturbation of the initial conditions produces an finite discrepancy after some oscillations. This suggests a chaotic behavior of the current and populations in the time dependent solution, similarly to that found in the stationary case.

(CNPq, FINEP, Projeto Antorchas/Vitae/Andes grant B-11487/4B005)

## ANOMALIAS NO COMPORTAMENTO LINEAR DA ENERGIA DE FOTOLUMINESCÊNCIA COM O CAMPO MAGNÉTICO EM POÇOS QUÂNTICOS ASSIMÉTRICOS

*Ademir Ricart Alves*

Universidade Federal de Viçosa - MG

*Luiz Alberto Cury, Paulo Sérgio Soares Guimarães e Marcus Vinicius Baeta Moreira*

Universidade Federal de Minas Gerais - MG

*Palavras-chave: poços quânticos, fotoluminescência, energia de recombinação*

A variação da energia de transição ( $E_{PL}$ ) elétron(e)-buraco(h) em um poço quântico relativamente largo é esperada ser linear com o campo magnético  $B$  aplicado perpendicularmente às interfaces. Contudo, têm-se observado desvios do comportamento linear nas mesmas regiões de  $B$  caracterizadas pelos platôs do efeito Hall quântico<sup>1,2</sup>. Nesse trabalho, utilizamos medidas magneto-ópticas em campos elevados (até 15 T) para estudar a dependência de  $E_{PL}$  com o campo magnético em um poço quântico assimétrico n-AlGaAs/InGaAs/GaAs de 200Å de largura, em que o primeiro nível eletrônico excitado ( $e_2$ ) se encontra a 5 meV acima de  $E_F$ .

Observamos que os desvios na curva  $E_{PL} \times B$  ocorrem quando um nível de Landau da sub-banda  $e_1$  passa por  $E_F$ . Verificamos ainda que as anomalias na energia de recombinação são mais intensas para a transição fundamental  $e_1-h_1$  do que para a transição  $e_2-h_1$ .

Ao contrário do efeito de blindagem sugerido por Goldberg et al.<sup>1</sup>, ou o cruzamento entre níveis de Landau das duas sub-bandas eletrônicas apontado por Driessen et al.<sup>2</sup>, concluímos que a origem desse fenômeno se deve a um aumento na energia de ligação entre os buracos de  $h_1$  e os elétrons em  $e_1$  quando um nível de Landau da sub-banda  $e_1$  passa por  $E_F$ .

(FAPEMIG, CAPES, CNPq)

<sup>1</sup> B. B. Goldberg et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 641 (1990).

<sup>2</sup> F. A. J. M. Driessen et al., Phys. Rev. B. **45**, 11823 (1992).

## PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE POÇOS QUÂNTICOS SIMÉTRICOS E ASSIMÉTRICOS DELTA DOPADOS.

Eduardo Kojy Takahashi<sup>†</sup>, Antônio Tadeu Lino<sup>†</sup>, Luisa Maria Ribeiro Scolfaro<sup>††</sup> e José Roberto Leite<sup>††</sup>

<sup>†</sup>Universidade Federal de Uberlândia, Departamento de Ciências Físicas, Caixa Postal 593, Uberlândia, MG

<sup>††</sup>Instituto de Física da Universidade de São Paulo, Caixa Postal 663 18, São Paulo, SP

*Palavras-Chaves: poços quânticos, estrutura eletrônica, delta-doping*

O estudo de propriedades eletrônicas decorrentes do confinamento de elétrons em heteroestruturas semicondutoras contendo dopantes dispostos em uma monocamada atômica ( $\delta$ -doping) apresenta grande interesse, tanto do ponto de vista da pesquisa básica, quanto pela potencial utilização em dispositivos ópticos e eletrônicos de alta mobilidade. Nestes sistemas, o gás de elétrons quase bidimensional fica sujeito a um potencial de confinamento originado pelas interfaces e pela camada de doadores ionizados. Alguns trabalhos teóricos e experimentais em poços quânticos de AlGaAs/GaAs e InGaAs/GaAs com dopagens planares no centro do poço podem ser encontrados na literatura. No entanto, estudos sistemáticos destes sistemas, considerando o efeito da posição do plano de dopagem no interior do poço sobre a estrutura eletrônica, não são de nosso conhecimento. Neste trabalho, apresentamos resultados de cálculos autoconsistentes da estrutura eletrônica dos sistemas ( $\delta$ -Si) AlGaAs/GaAs e ( $\delta$ -Si) InGaAs/GaAs dentro do formalismo da teoria da massa efetiva e da aproximação da densidade local (LDA). Para cada sistema estudado, variamos a largura do poço de 50 a 300 Å e a concentração de Si de  $10^{11}$  a  $10^{13}$  cm. Consideramos, ainda, dois tipos de sistemas, de acordo com a posição do plano de dopagem. No caso de poços quânticos simétricos, os planos de dopagem foram colocados no centro do poço, enquanto no poço quântico assimétrico eles ocuparam posições intermediárias entre o centro do poço e uma das interfaces. Os resultados dos níveis de energia, energia de Fermi, potencial autoconsistente e densidade de carga eletrônica são apresentados e discutidos.

## ACEITADORES CONFINADOS EM ILHAS EM INTERFACES DE POÇOS QUÂNTICOS DE GaAs/Ga<sub>0,7</sub>Al<sub>0,3</sub>As

José Brás Barreto de Oliveira<sup>a</sup>, Eliermes Arraes Meneses<sup>b</sup> e E. C. F. Silva<sup>c</sup>

a) Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP

b) Departamento de Física-FC, Universidade Estadual Paulista, Bauru-SP

c) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

*Palavras Chaves: aceitadores, poços quânticos, medidas ópticas*

Neste trabalho estudamos um sistema de múltiplos poços quânticos de GaAs/Ga<sub>0,7</sub>Al<sub>0,3</sub>As onde os poços e as barreiras possuem 45 e 300 Å de largura, respectivamente. Os poços são dopados com Be (exceto duas monocamadas próximas a cada interface) a uma concentração de  $10^{16}$  cm<sup>-3</sup>. O espectro de fotoluminescência de excitação (PLE) apresenta três picos os quais estão associados a éxcitons confinados em ilhas na interface. Medidas de fotoluminescência (PL) em função da temperatura e da potência de excitação dão suporte a esta conclusão. Analisamos a transição "free-to-bound" (FB) associada ao aceitador de Be, através de excitação seletiva, e pudemos observar as emissões relacionadas aos aceitadores confinados em cada ilha. Foram medidas as energias de ligação dos aceitadores e os resultados foram comparados com os valores calculados. Uma análise da forma de linha das transições FB também é apresentada. Medimos as energias dos estados excitados dos aceitadores confinados e os valores foram comparados com resultados teóricos [1].

[1] - W. T. Masselink, Y-C. Chang and H. Markoç, Phys. Rev. B 32, 5190 (1985).

## O COMPORTAMENTO DE PORTADORES EM SUPER-REDES DELTA-DOPADAS SUBMETIDAS A CAMPOS MAGNÉTICOS IN-PLANE

Antônio Tadeu Lino<sup>†</sup>, Eduardo Kojy Takahashi<sup>†</sup>, Daniel Ricardo Cunha Oliveira<sup>†</sup>, Luisa Maria Ribeiro Scolfaro<sup>††</sup>, e José Roberto Leite<sup>††</sup>

<sup>†</sup>Universidade Federal de Uberlândia, Departamento de Ciências Físicas, Caixa Postal 593, Uberlândia, MG

<sup>††</sup>Instituto de Física da Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, São Paulo, SP

Foram efetuados cálculos autoconsistentes de super-redes delta-dopadas em presença de campos magnéticos in-plane utilizando o formalismo das aproximações de Densidade Local (LDA) e Massa Efetiva. Investigamos super-redes compostas de camadas de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  separados por layers de GaAs com dopagem de silício no centro do poço. Os elétrons liberados pelos átomos de silício formam um gás quasi-bidimensional que fica confinado dentro do poço. Nós analisamos o comportamento deste gás de elétrons submetido a um campo magnético paralelo às interfaces (in-plane). A presença do campo magnético muda a natureza da estrutura das sub-bandas devido à relação entre  $k_x$ , o momento in-plane perpendicular ao campo e a posição do centro da órbita no eixo de crescimento  $z$ . Os cálculos numéricos foram baseados nas soluções autoconsistentes das equações de Schroedinger e de Poisson, onde foram incluídos os efeitos de muitos corpos, tais como o efeito de exchange e de correlação, de acordo com o formalismo LDA. Da análise dos resultados para vários períodos diferentes e concentrações de doadores, nós concluímos que as dispersões de energias para elétrons e buracos foram consideravelmente perturbadas. A característica de máximo duplo, observada para o poço quântico isolado na dispersão de energia de buracos, em cálculos anteriores, foi também obtida para estes sistemas, enquanto que para elétrons, o mínimo nas curvas de dispersão foi mantido em  $k_x=0$ .

## Espalhamento Raman por excitações de densidade de carga em sistemas eletrônicos não-uniformes

V. Anjos, L. Ioriatti

Instituto de Física de São Carlos-USP

**Palavras-Chave:** Raman, Super-rede, delta-doping, flutuação de densidade de carga.

Apresentamos uma teoria de espalhamento inelástico de luz via mecanismo de flutuação de densidade de carga para sistemas eletrônicos não uniformes em condições de extrema ressonância. A seção de choque do espalhamento é expressa como a parte imaginária de uma função resposta constituída por dois termos: um responsável por excitações de partícula independente e um outro responsável pelas excitações coletivas. Deste modo é elucidada de forma inequívoca a presença, em condições de extrema ressonância, de excitações de partícula independente que de outra forma seriam blindadas pelas interações elétron-elétron. Nos cálculos são levadas em conta as interações Coulombianas entre os portadores, efeito de exchange e correlação dinâmicos e a interação com o fônon LO. Especificamente utilizamos como sistema não-uniforme o gás de elétrons de uma super-rede  $\delta$ -Si:GaAs com 500Å de período, densidade eletrônica de  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  e distribuição gaussiana de dopantes com FWHM de 50Å. A escolha deste sistema reside no fato de suas linhas espectrais dependerem fortemente da frequência de radiação de excitação tanto no espectro polarizado quanto no depolarizado, conforme reportado na literatura [1]. Nos cálculos numéricos do espectro polarizado utilizamos a geometria de retro-espalhamento com a energia dos fótons incidentes ressonante com o gap de split-off do GaAs. Propõem-se ainda uma função espectral para o amortecimento das flutuações de densidade, a partir da conservação local de corrente.

[1] A.C. Maciel et al, Surf. Sci. 228, 251 (1990)

(CAPES)

## Quantum chaos in a magnetic hydrogenic impurity in a quantum well

*Ivan F. Costa, Peter A. B. Schulz, José A. Brum*  
IFGW- DFESCM, Universidade Estadual de Campinas, 13081-970 Campinas (SP)

*Palavras Chave:* chaos, quantum-well, magnetic field

There is currently a great deal of interest in the quantum properties of systems with underlying classical chaotic dynamics. Recent developments in epitaxial growth and submicron lithography made it possible to obtain mesoscopic devices with chaotic dynamics in a classical regime, where quantum effects can also be observed in a controllable way. The link between classical and quantum regimes is given by the fact that chaotic behavior in the classical regime manifests itself in the properties of the corresponding quantum energy spectrum. Therefore the first step to understand quantum chaotic behavior is the analysis of correlations in the energy spectrum. Energy level statistics show a Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE) distribution when the system shows chaotic dynamics in the classical limit.

In this work, we study numerically the manifestations of chaos in the energy level spectrum of a three-dimensional hydrogen impurity in a parabolic quantum well in the presence of a magnetic field normal to the plane. The onset of chaotic behavior comes from the destruction of the rotational symmetry by the confining potential. The calculated energy level statistics of the spectrum evolve from Poisson to GOE according to the regular or chaotic character of the motion, as expected. The correspondence between a chaotic classical system and its quantum analog is also very important in low-energy transport through wells with impurities and in excitonic recombination in quantum wells.

## PROPRIEDADES ÓTICAS DE POÇOS QUÂNTICOS InGaAs/GaAs E GaAlAs/GaAs CRESCIDOS POR EPITAXIA DE FEIXE MOLECULAR

*S. Martini, A. Tabata, A. Marti Ceschin, L.M.R. Scolfaro e J. R. Leite*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo, S.P. Brasil

*Palavras-chave:* fotoluminescência, poços quânticos, InGaAs/GaAlAs/GaAs

O sistema InGaAs/GaAlAs/GaAs tem recebido nesses últimos anos uma grande atenção pela comunidade científica, devido à suas aplicações na indústria de microeletrônica e optoeletrônica. Assim, estudos associados à problemas de interfaces e aos mecanismos de captura e emissão de poços nesse sistema mostram-se de interesse bastante grande. Estudamos por fotoluminescência (PL), em função da temperatura e da potência de excitação, poços quânticos (QW) de  $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}/\text{GaAs}$  e  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,70}\text{Al}_{0,30}\text{As}$  crescidos por MBE em nosso laboratório. Diferentes tipos e larguras de poços ( $L_w$ ) foram examinados. Observamos uma nítida diferença na forma da linha de emissão de PL para cada tipo de QW. Enquanto nos poços de InGaAs a emissão PL era perfeitamente simétrica, nas emissões dos poços de InGaAs, um alargamento no lado de baixa energia foi observado. Para os QW's de InGaAs observamos que a largura a meia altura do espectro de PL aumenta com o aumento de  $L_w$ ; para os poços de GaAs um comportamento inverso foi observado. Experiências em função da temperatura da amostra mostraram que os portadores armadilhados nos QW's de menores espessuras eram re-emitidos para a barreira em temperaturas menores que estes dos poços mais largos e também que em altas temperaturas somente as emissões dos poços de GaAs permaneciam. A partir desses dados mostramos a existência das seguintes diferenças entre os poços de InGaAs/GaAs e GaAs/GaAlAs: diferenças na qualidade cristalina das suas respectivas interfaces; na interação da função de onda dos portadores com os diferentes tipos de barreira/poço quântico e nos mecanismos de captura e emissão dos poços. Cálculos auto-consistentes para os estados confinados no poço foram realizados e um bom acordo com os resultados experimentais foram obtidos.

(CAPES, CNPq, FAPESP)

## ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE $\delta$ -FETs DE Sb EM Si

*José Eduardo Manzoli*

Ciência e Engenharia de Materiais - São Carlos - USP

*Oscar Hipólito*

DFCM - IFSC - USP

*Palavras-chave:* delta-fet, capacitância, auto-consistência

Neste trabalho apresentamos cálculos numéricos auto-consistentes da estrutura eletrônica de  $\delta$ -FETs, transistores de efeito de campo cujo canal de transporte elétrico se constitui em um plano quasi-bidimensional de dopagem de Antimônio no Silício. A importância tecnológica destes dispositivos semicondutores é grande, haja visto seus altos valores de mobilidade elétrica. O  $\delta$ -doping no Silício tem sido conseguido por epitaxia da fase-sólida ou dopagem por feixe de íons. Como a massa efetiva eletrônica no Si é maior do que no GaAs a dopagem no Si permite uma menor separação entre deltas acopladas quando comparada a um análogo acoplamento no GaAs. Incluímos os efeitos de correlação e troca, fizemos os cálculos tanto para os elétrons 'pesados' quanto para os 'leves' à 77 e 300K, variando a voltagem do gate para dispositivos com uma, duas, três e quatro deltas acopladas. Obtemos o potencial efetivo, as sub-bandas e respectivas densidades eletrônicas. A capacitância-DC calculada é uma importante característica do dispositivo por estimar as frequências dos sinais elétricos para sua operação e as distribuições eletrônicas nas sub-bandas estimam as condições onde é mínimo o espalhamento iônico, permitindo maximizar a mobilidade no dispositivo.

(FAPESP, Centro Nacional de Supercomputação - UFRGS)

## NOVOS RESULTADOS PARA ÉXCITONS LIGADOS EM POÇOS QUÂNTICOS

José Brás Barreto de Oliveira<sup>a</sup>, Eliermes Arraes Meneses<sup>b</sup> e E. C. F. Silva<sup>c</sup>

a) Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP

b) Departamento de Física-FC, Universidade Estadual Paulista, Bauru-SP

c) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP, Brasil

*Palavras Chaves:* Éxcitons, Poços Quânticos, medidas ópticas

Em trabalho recente, Srinivas e colaboradores[1] discutiram a formação de éxcitons ligados a partir da ativação de defeitos na barreira, ocorrida a partir de excitação com energia acima do gap da barreira. Neste trabalho apresentamos resultados de fotoluminescência (PL) e fotoluminescência de excitação (PLE) para uma amostra de múltiplos poços quânticos de GaAs/Ga<sub>0,7</sub>Al<sub>0,3</sub>As. Os espectros de PL mostram um pico com energia de 1.2 meV abaixo da transição do éxciton livre, o qual foi associado a um éxciton ligado a partir de medidas de PLE e de PL em função da temperatura e da potência de excitação. Uma análise da forma de linha da PL confirma esta interpretação. Por outro lado, medidas de PL para diferentes energias de excitação mostram uma variação monotônica na intensidade dos picos. O pico associado ao éxciton ligado se torna predominante para altas energias de excitação devido aos mecanismos de relaxação e captura. Nossos resultados mostram a presença inequívoca do éxciton ligado mesmo para excitações com energias abaixo do gap da barreira. Destes concluímos, diferentemente dos autores da referência 1, que os éxcitons são ligados a defeitos ionizados localizados na interface.

[1] V. Srinivas, Y. J. Chen, and C. E. C. Wood, Solid State Commun., 89, 611 (1994)

## PROPRIEDADES ÓTICAS DE SUPER-REDES DE (GaAs)/(AlAs) CRESCIDAS NAS DIREÇÕES (100) E (n11)A e B COM $n=1,2,3,5,7$

*E. Marega Jr., A. L. Libardi, V. L. Campo Jr., D. I. Lubyshev  
P. P. Gonzalez Borrero e P. Basmaji*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

**Palavras-Chave:** semicondutor, super-rede, Arseneto de Alumínio

Durante a década passada o estudo das propriedades eletrônicas de estruturas de GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, utilizadas em super-redes, poços quânticos e em heteroestruturas foi extensamente abordada. Muitos dos estudos feitos até então, tem focado as propriedades óticas e de transporte deste material, porém observa-se pouca informação (proporcionalmente) sobre as propriedades de sistemas bidimensionais de AlAs. A estrutura do AlAs é particularmente interessante, devido à uma série de razões. Primeiramente sua estrutura de bandas é muito similar à do Si, entretanto o mínimo da banda de condução do AlAs está no ponto X da zona de Brillouin, 84.5% abaixo em energia do que o ponto  $\Gamma$ . Isto pode levar à comparação entre dispositivos a base de Si do tipo metal-óxido-semicondutor, com heteroestruturas deste material, devido à similaridade na estrutura de bandas.

Neste trabalho apresentamos estudos feitos com a técnica de fotoluminescência em super-redes de (GaAs)/(AlAs), crescidas por MBE sob substratos semi-isolantes orientados nas direções (100) e (n11) com  $n=1,2,3,5,7$  nas polaridades A e B. As estruturas estudadas foram crescidas simultaneamente num mesmo porta-amostra a uma temperatura de 680°C. A eficiência quântica e a posição do pico de luminescência observado para a estrutura, estão fortemente correlacionados à direção de crescimento. A partir da análise pudemos inferir sobre as condições de crescimento, propriedades estruturais (efeito da corrugação na interface entre os dois materiais na posição e largura do pico de luminescência).

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## ESTADOS EXCITADOS DE DOADORES RASOS LIGADOS AOS VALES X EM ESTRUTURAS TIPO II DE GaAs/AlAs

*Gleise N. Carneiro\* e Gerald Weber†*

\*Departamento de Física da Universidade do Estado de Santa Catarina

†Instituto de Pesquisa (IPPEX), Universidade São Francisco

**Palavras-Chave:** doadores, estados excitados, poços tipo II

Nos últimos anos houve um intenso esforço no estudo teórico e experimental de impurezas rasas em poços quânticos de GaAs-AlGaAs do tipo I. Em poços tipo II a transição entre-bandas de menor energia é indireta no espaço real e os doadores ficam ligados aos vales X do AlAs. Estes vales possuem uma forte anisotropia de massa e os vales  $X_{z,y}$  e  $X_z$  (onde  $z$  é a direção de crescimento) não são mais degenerados. Neste trabalho utilizamos um procedimento variacional, que se mostrou muito bem sucedido para estados  $1s$  em poços tipo II [G. Weber, Appl. Phys. Lett. **67**, 1447 (1995)], e que representa adequadamente tanto o efeito de anisotropia das massas como o confinamento quântico na direção  $z$  de modo a obter os estados excitados de doadores em poços tipo II. Em um estudo comparativo, usamos dois conjuntos de massa efetiva para o vale X do AlAs obtidos por medidas diferentes [B. Rheinländer, *et al.*, Phys. Stat. Sol. (b) **49**, K167 (1972); M. Goiran *et al.*, Physica B **177**, 465 (1992)]. As energias de ligação obtidas são bastante profundas (na ordem de 100 meV ou mais) e para o estado fundamental concordam bem com resultados experimentais disponíveis. Mostramos que as energias de ligação têm uma forte dependência com as massas efetivas, bem como com a largura da camada de AlAs e a posição de impureza.

## OPTICAL PROPERTIES OF VERTICALLY ALIGNED SELF-ASSEMBLED InGaAs QUANTUM DOTS LAYERS ON (311)A/B AND (100) GaAs SUBSTRATES

*P.P. González-Borrero, D.I. Lubyshev, E. Petitprez, E. Marega Jr., and P. Basmaji*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

Palavras-Chave: semiconductor, quantum dots, high-index

Vertically self-organized growth of InAs islands separated by GaAs spacer layer has been reported in molecular-beam epitaxy (MBE) on (100) GaAs substrates<sup>1</sup>. In this work, we present substrate orientation effects on optical properties of vertically stacking In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As layers grown by MBE on (311)A/B and reference (100) GaAs substrates mounted on the same substrate holder. For quantum dots (QD) formation, 6 monolayers (ML) of In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As were deposited for (100) plane. Then, GaAs spacer layers were deposited at the same temperature. Growth interruption during 3 min. before and after In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As deposition, was carried out. In order to provide the vertically collinearity of the islands, this combination of 6 ML In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As and GaAs spacer layer was repeated 10 times. To complete the structure, a 50 nm GaAs cap layer was deposited. Samples were grown for different GaAs spacer thickness. The spacer thickness variation shows influence in PL spectra for all planes. Difference on peak shape, peak position, amplitude and integral luminescence has been observed for all surfaces. These differences suggest that the In migration on the spacer layer caused by the strain fields induced in the spacer layer by the islands buried below, is different in the three surfaces. Vertical electronic coupling between QD is confirmed by photoluminescence (PL) temperature dependence. Low temperature PL measurements indicate the presence of non-vertically aligned In<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As QD principally on (311) surfaces.

Reference:

1. Qianghua Xie et al., Phys. Rev. Lett. 75, 2542 (1995)

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## OPTICAL PROPERTIES OF SELF-ASSEMBLED InAs QUANTUM DOTS ON HIGH-INDEX GaAs SUBSTRATES

*P.P. González-Borrero, E. Marega Jr., D.I. Lubyshev, E. Petitprez and P. Basmaji*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

Palavras-Chave: semiconductor, quantum dots, high-index

The optical properties of InAs QD grown by molecular-beam epitaxy on GaAs (n11)A/B, where n is 1, 2, 5 and 7, and reference (100) substrates, have been studied. For quantum dots (QD) formation, 6 monolayers (ML) were deposited for (100) plane. We have investigated orientation and polarity effects by means of photoluminescence (PL) and polarization measurements. The PL spectra reveal difference on amplitude, integral luminescence, peak position and peak shape. The PL temperature dependence indicates an additional lateral confinement on (100), (211)B, (511)B, (711)B, (111)B, (211)A and (111)A surfaces. This dependence confirms QD formation on these planes. Our results also show an enhancement of the QD onset thermal quenching energy by a factor of 2.5 for these orientations. Based on our QD PL polarization measurements we suppose that QD have well developed microfacet configuration. Contrary, the structure grown on (711)A and (511)A surface does not exhibit QD formation for 6ML although present a broader PL peak related with recombination of a 2D InAs QW.

We believe that the observed polarity (A/B) effects on stress relaxation are caused by different growth mode: Stranski-Krastanow (2D+3D) for (100), (n11)B, (211)A and (111)A surfaces, and Volmer-Weber (2D) for (711)A and (511)A one. The detected orientation and polarity effects on PL properties reveal that In adatom kinetic is an important mechanism of stress relaxation.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## OBSERVATION OF THE WANNIER-STARK LADDERS ASSOCIATED TO THE LIGHT-HOLE GROUND STATE AND HEAVY-HOLE FIRST EXCITED STATE IN GaInAs-AlGaInAs SUPERLATTICES

*J. Depeyrol<sup>†</sup>, G. Wang<sup>‡</sup>, R. Mellitt<sup>‡</sup>, P. Tronc<sup>‡</sup>, J-C. Harmand<sup>††</sup> & J-F. Palmier<sup>††</sup>*

<sup>†</sup> UnB - Departamento de Física - Brasília

<sup>‡</sup> ESPCI - Lab. d'Optique Physique - Paris

<sup>††</sup> Centre National d'Etudes des Télécommunications - Bagneux

*Palavras-Chave:* superlattice, exciton, electric field

Photoluminescence excitation (PLE) experiments have been performed with non-intentionally doped GaInAs-AlGaInAs superlattices (SL's) lattice-matched to InP substrates. In similar samples it has been shown by photoluminescence experiments that the fluctuations of composition confine the ground electron and heavy-hole states within a single well.

Our PLE spectra exhibit transitions corresponding to the 1s ground state and 2s first excited state of the heavy-hole exciton and the Wannier-Stark ladder associated with the light-hole. Moreover, three other lines are shown to be related to transitions between the ground state of the electron and the first excited state of the heavy-hole. The first of the three lines is assigned to the direct transition in the real space. This transition is weakly allowed due to the built-in voltage existing in the SL. The two others lines correspond respectively to the +1 and -1 transitions of the Wannier-Stark ladder associated with the first excited heavy-hole state. Calculations based on Airy functions strongly support our interpretations.

## SISTEMA AUTOMATIZADO PARA MEDIDAS DE FOTOREFLETÂNCIA

*Edson Laureto, Dari de O. Toginho Filho, Hiromi Iwamoto, Maria T. P. de Freitas, José L. Duarte, Ivan F. L. Dias*

Depto. de Física, Centro de Ciências Exatas, Universidade Estadual de Londrina - PR

*Palavras-Chave:* automação, fotorefletância, semicondutores

A técnica de fotorefletância consiste, basicamente, na medida da variação relativa da refletância ( $\Delta R/R$ ) da amostra em função do comprimento de onda da luz incidente, quando se faz a modulação do campo elétrico interno da amostra através da incidência de um segundo feixe de luz, modulado e monocromático, cuja energia é superior à energia da banda proibida do material. A fotorefletância é uma técnica que, além de não requerer um grande investimento financeiro para a sua implantação, permite a obtenção de informações importantes à temperatura de nitrogênio líquido, ou mesmo à temperatura ambiente. Neste trabalho é descrito o sistema experimental montado para realização de medidas de fotorefletância em nosso laboratório. Nesse sistema, tanto a aquisição de dados quanto o controle do experimento são feitos por um microcomputador através de uma placa de interface. As entradas analógicas desta placa recebem os sinais proporcionais à refletividade  $R$  e à variação da refletividade  $\Delta R$  provenientes de um pré-amplificador e de um amplificador síncrono Lock-in, respectivamente. A varredura em comprimento de onda da luz incidente na amostra (feixe de prova) é feita por um motor de passo acoplado ao monocromador e acionado pelo Módulo de Controle do Motor. Este módulo está ligado a uma das saídas digitais da placa de interface. Foi também desenvolvido um programa de aquisição que trabalha em ambiente Windows para monitoramento da experiência. A finalidade deste aparato experimental é estudar as propriedades óticas de materiais semicondutores, em particular as microestruturas crescidas pela técnica de MBE (Epitaxia por Feixe Molecular) e de CBE (Epitaxia por Feixe Químico).

(Fundação Banco do Brasil, CNPq e CPG/UEL)

## RESONANCE PROPERTIES ON PERIODIC AND APERIODIC SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE

*Diógenes Bosquetti, Pierre Basmaji, Oscar Hipólito and Euclides Marega Jr.*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP

**Palavras-Chave:** Stark-ladder, delocalization of eigen-states under an electric field, Bloch oscillations.

When we investigate periodic heterostructures in the absence of electric field, we find always that the wave functions which are eigen-states of the system are delocalized, i.e., extending over the entire system. The energy difference of levels are practically the same, depending strongly of geometrical parameters and effective mass carriers. If the electric field is take account, it bends the system and changes all energy levels and obtaining the Stark-ladder regime. For specific values of electric field, two different energy levels have practically the same values and the resonance condition are obtained. In this condition, the wave-functions forms changes, being a combination of two levels.

Considering now one finite aperiodic semiconductor heterostructure, we can observed an interesting contrary effect of an external field behavior. The wave functions, who are localized in the absence of electric field, becomes more and more delocalized and for a specific electric field value, the states forms a mini-band of energy like as obtained in bulk materials. It happens because a great quantities of states enter in a resonance condition in the neighborhood of an specific electric field value.

In this work, we investigate the effect of an external field when applied in a periodic and aperiodic finite GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0.1 ≤ x ≤ 1) semiconductor heterostructure which the thickness of wells and barriers increase gradually in the structure (one monolayer/period). Using the Split-Operator method we numerically solve these systems in different electric fields value, temperature and aluminum concentration, comparing the periodic and aperiodic behavior.

(CNPq - FINEP - FAPESP)

## LUMINESCENCE FROM n- AND p-TYPE δ-DOPING WELLS IN GaAs: A COMPARATIVE THEORETICAL STUDY

*G.M. Sipahi, R. Enderlein, L.M.R. Scolfaro, and J.R. Leite*  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo, DFMT  
C.P. 66318, 05389-970 São Paulo, SP

**Palavras-Chave:** luminescence, delta-doping, p- and n-type

Recent experimental photoluminescence (PL) investigations have revealed an interesting puzzle: PL from p-type δ-doping wells turns out to be at least one order of magnitude stronger than that from n-type δ-doping wells having the same sheet-doping concentration. In this paper we present calculations of PL spectra for both types of wells which confirm this order of magnitude difference. The calculations are based on our recently developed method for self-consistent band structure calculations of holes within the 4 × 4 Luttinger-Kohn multi-band envelope function theory [1]. This method is extended to the 8 × 8 Kane Hamiltonian in order to be able to calculate electron band structures and eigenfunctions from the same model as for holes. The overlap integral between electron and hole envelope wave functions turns out to be the crucial quantity for the radiative recombination probability. The magnitude of this integral differs appreciably for n- and p-type δ-doping wells. Physically this may be understood in terms of tunneling of photo-excited minority carriers through the potential barrier formed by the majority carriers potential well, taking into account that this well is deeper and wider for the electrons of n-type δ-doping samples than for the holes of p-type δ-doping samples, mainly because of the more perfect screening of the ionized dopant sheets by the heavier and thus more strongly localized holes. We present self-consistently calculated electron and hole wells, band structures and PL spectra for n-type and p-type δ-doping samples in a wide range of doping concentrations. In both types of samples, PL peaks due to transitions into light hole bands are more pronounced than those due to transitions into heavy hole bands.

[1] G.M. Sipahi, R. Enderlein, L.M.R. Scolfaro, and J.R. Leite, Phys. Rev. B53 (1996).

## SPATIALLY DIRECT RADIATIVE RECOMBINATIONS OBSERVED IN MULTIPLE $\delta$ -DOPED GAAS LAYERS

A. Levine, E.C.F. da Silva, L. M. R. Scolfaro, D. Beliaev, A. A. Quivy, R. Enderlein, and J. R. Leite

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, C.P. 66318, 05389-970, São Paulo, SP, Brazil

*Palavras-Chave: delta-doping, superlattice, GaAs:Si*

In this work, experimental and theoretical studies of multiple Si  $\delta$ -doped GaAs layers (M $\delta$ -doped) are reported. Photoluminescence (PL) are measured and compared with results of self-consistent electronic structure (SCF) calculations. A series of samples with different donor concentrations in the  $\delta$ -doped layer ( $N_D = n_D \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  with  $n_D = 1, 3, 5, 7, 9$ ) and a fixed distance between adjacent Si-doped layers ( $d_s=300\text{\AA}$ ) was analyzed. Besides various GaAs related emission structures which arise from the buffer layer, the PL spectra also show bands below (A-band) and above (B-band) the fundamental band edge of GaAs. It can be seen (Fig. 1) that the A-band is strongly dependent on the value of  $N_D$ . In order to compare theoretical and experimental results we include the band gap renormalization in the calculation by combining theoretical and experimental values of the cutoff energy. A good agreement between theoretical and experimental data was found and, with this procedure, we could identify the observed emission bands as spatially direct transitions involving electrons associated with the subband structure of the M $\delta$ -doped layers. Contrary to previous reported data, which correlate the A-bands to the superlattice miniband transitions, we have found that they arise from transitions involving localized states of carbon impurities.

(CNPq)

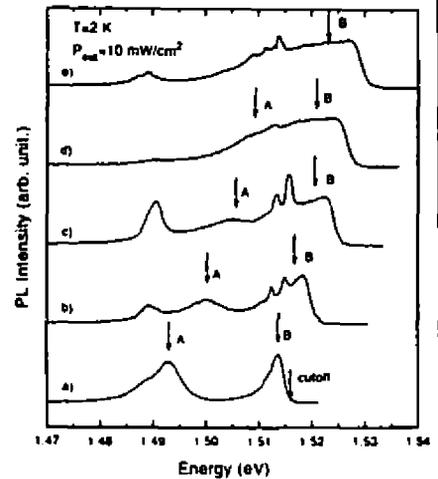


Fig. 1 - PL spectra from GaAs M $\delta$ -doped GaAs layers with doping period  $d_s=300\text{\AA}$  and different nominal donor concentrations:  $N_D = n_D \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . a)  $n_D=1$ , b)  $n_D=3$ , c)  $n_D=5$ , d)  $n_D=7$ , and e)  $n_D=9$ .

## HOLE BAND STRUCTURE OF SILICON-BASED p-TYPE $\delta$ -DOPING QUANTUM WELLS

W.M. Castilho, G.M. Sipahi, R. Enderlein, L.M.R. Scolfaro, and J.R. Leite

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, DFMT

C.P. 66318, 05389-970, São Paulo, SP

*Palavras-Chave: silicon, p-type delta-doping, hole band structure*

Despite the already existing experimental work on p-type  $\delta$ -doping quantum wells in Silicon, the hole band structure of these systems is unknown thus far. In the present paper we solve this problem. As in the case of GaAs, self-consistent solutions of a multi-band effective mass equation are necessary. Unlike GaAs, however, the  $4 \times 4$  Luttinger-Kohn Hamiltonian does not apply because the spin-orbit-split  $\Gamma_7$  band is close to the  $\Gamma_8$  heavy and light hole band. Although the use of the  $3 \times 3$ -Hamiltonian of the spin-less  $\Gamma_{25}$  valence band would be the most natural and direct approach, we employ the more general  $8 \times 8$  Kane-Hamiltonian and adapt it to Silicon by setting the spin-orbit-splitting energy  $\Delta$  and the Kane matrix element  $P$  to zero. In this way we are able to utilize our already existing program for the  $8 \times 8$  Kane multiband effective mass equation. The calculations rely on a plane wave expansion of this equation. The hole-hole interaction, including exchange and correlation, is taken into account self-consistently. The method is used to calculate potential profiles, subband and miniband structures as well as Fermi level positions for a series of p-type  $\delta$ -doping quantum wells. The wells for holes turn out to be relatively flat, like in the case of GaAs, mainly due to the large effective heavy hole mass. We conclude that sheet doping concentrations larger than  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  are necessary for confinement effects to be observable.

## DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ESTRUTURAIS DE SUPER-REDES DE Si/Ge

H.T. Palacios, C.A.M. Carvalho e M.C.A. Fantini  
Instituto de Física, USP, DFA, CP 66318, 05389-970, São Paulo, SP

**Palavras-Chave:** super-redes, silício/germânio, difração de raios-X.

A estrutura de camadas heteroepitaxiais a base de silício e germânio, crescidas sobre substrato de silício pelo método de Molecular Beam Epitaxy (MBE), foi analisada por difração de raios-X. A técnica de MBE permite o crescimento de heteroestruturas com camadas em escala atômica, através de um controle e ajuste muito preciso dos parâmetros de deposição, como composição e espessura das camadas. Entretanto, a verificação da estrutura real obtida requer caracterização posterior ao crescimento. A obtenção de *rocking-curves* de difração de raios-X permite obter os parâmetros estruturais de interesse: período médio da super-rede, parâmetro de rede médio nas direções perpendicular e paralela ao substrato, distorções estruturais decorrentes de tensões na super-rede e propriedades das interfaces. Neste trabalho foram caracterizadas amostras diferentes de heteroestruturas a base de silício e germânio. Estas consistem de uma superposição de duas estruturas: uma interna de período menor  $d$ , formada por bicamadas monocristalinas de Si-Ge e outra estrutura de repetição maior  $D$ , composta por seis bicamadas de Si-Ge mais uma camada *buffer* de Si, cuja função é de diminuir as tensões decorrentes das diferenças entre os parâmetros de rede do silício e do germânio. A amostra total é formada por dez períodos de valor  $D$ . A espessura dos componentes da bicamada variou entre 5 e 7 monocamadas de Si ou Ge, enquanto que a camada espaçadora de Si possui em torno de 360 monocamadas. Medidas de difração de raios-X foram realizadas em dois equipamentos diferentes: difratômetro de pó (varredura  $\theta$ - $2\theta$ ) e difratômetro de duplo-cristal (*rocking-curves*). As medidas cobriram uma faixa angular de  $2\theta \approx 1^\circ - 80^\circ$  e foram realizadas com radiação Cu  $\alpha$ , monocromática. A determinação dos parâmetros estruturais foi baseada nas medidas de maior intensidade obtidas no difratômetro de pó e de maior resolução obtidas no difratômetro de duplo-cristal. Os resultados experimentais foram simulados pelas teorias cinemática e dinâmica de difração de raios-X e os parâmetros estruturais obtidos foram comparados com os valores nominais.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## CARACTERIZAÇÃO DE ESTRUTURAS QUASE-PERIÓDICAS

P. M. C. de Oliveira<sup>(1)</sup>, E. L. de Albuquerque<sup>(2)</sup> e A. M. Mariz<sup>(2)</sup>

(1) : Instituto de Física, UFF, Niterói, RJ

(2) : Departamento de Física, UFRN, Natal, RN

**Palavras-Chave:** Sequências Quase-Periódicas, Transmissividade, Mapa de Retorno

Nas últimas décadas, o estudo de multi-camadas tem se intensificado, em conexão com a descoberta das inúmeras propriedades tecnológicas das Super-Redes (superposição de camadas de 2 ou mais diferentes materiais, segundo uma ordem pré-definida). Entre os casos extremos de um ordenamento periódico ou aleatório das camadas, especial interesse tem sido dedicado ao estudo das *Super-Redes Quase-Periódicas* (onde o ordenamento das camadas ainda que não aleatório não possui período comensurável).

Realizações experimentais (Merlin R. et al, Phys. Rev. Lett 55, 1768, 1985) e trabalhos teóricos (Kohomoto M. et al, Phys. Rev. Lett. 58, 2436, 1987; Lagté A. and Claro F., Opt. Comm. 94, 389, 1992) mostraram que estes sistemas apresentavam, entre outras interessantes propriedades, *fractalidade* nos seus espectros de energia e de transmissão de luz.

Nosso objetivo, neste trabalho, foi de investigar um modo de caracterização da ordem de longo alcance subjacente à estas estruturas. Investigamos a probabilidade de transmissão de uma partícula através de uma cadeia de barreiras de potenciais  $A$  e  $B$ , ordenadas segundo as seqüências de *Fibonacci* ( $S_1 = A$ ,  $S_2 = AB$ ,  $S_N = S_{N-1}S_{N-2}$ ), de *Cantor* ( $S_0 = A$ ,  $S_0' = B$ ,  $S_{N+1} = S_N S_N' S_N$ ,  $S_{N+1}' = S_N' S_N' S_N'$ ) e de *Thue-Morse* ( $S_0 = A$ ,  $S_0' = B$ ,  $S_{N+1} = S_N S_N'$ ,  $S_{N+1}' = S_N' S_N$ ).

Além do aspecto fractal obtido para o espectro (diferentes para cada caso), observamos que o *mapa de retorno*  $T_N \times T_{N+1}$  ( $T_N$  é a transmissividade da seqüência com  $N$  iterações) possui *atratores que são qualitativamente diferentes para cada uma das seqüências examinadas*; Para uma dada seqüência, o atrator, calculado em diferentes valores da energia, possui a mesma forma, a qual, de algum modo, é uma "assinatura" da ordem inerente à estrutura.

(CNPq)

## ESTUDO POR ESPECTROSCOPIA RAMAN DA INTERAÇÃO ELETRON-FÔNON TIPO-FANO EM SUPER-REDES DE GaAs COM DOPAGEM - $\delta$

*Yu.A.Pusep, M.T.O.Silva, S.W. da Silva\*, J.C.Galzerani, L.M.R.Scolfaro†, R.Enderlein\*,  
A.A.Quivy‡, A.P.Lima‡, J.R.Leite‡*

Universidade Federal de São Carlos, 13565-905 São Carlos, SP., Brasil

\* Instituto de Física de São Carlos, USP, 13560-970 São Carlos, SP., Brasil

† Universidade de São Paulo, 05389-970 São Paulo, SP., Brasil

*Palavras-Chave:* raman, super-redes, efeito fano

O acoplamento entre fônons LO e as excitações coletivas do gás de elétrons (ou plasmons) pode ser observado tanto em semicondutores "bulk" uniformemente dopados, quanto em hetero-estruturas semicondutoras tais como Super-redes (SL's) e Poços Quânticos (QW's). Em SL's com dopagem- $\delta$ , a estrutura de sub-bandas é tal que permite a existência de um contínuo não blindado de excitações do tipo pares elétron-buraco na banda de condução que coexiste no espaço de energias com o estado discreto de um fônon LO. Isto ocorre devido ao potencial elétrico de Fröhlich e pode ser interpretado como resultado de uma interação discreto-contínuo do tipo de Fano. Para analisar a ressonância de Fano, SL's de GaAs com dopagem -  $\delta$  de Si, crescidas por MBE em substratos de GaAs (100), foram estudadas por espalhamento Raman em geometria "backscattering", em T=10K. A densidade eletrônica N variou no intervalo  $(1-11) \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . A separação entre as camadas com dopagem- $\delta$  foi de  $d=300\text{\AA}$  e o período de 50 vezes. Para excitação, próxima à ressonância  $E_0+\Delta_0$  do GaAs, utilizou-se a linha de um laser de corante (DCM). Os espectros assim obtidos apresentaram duas características: a interação tipo-Fano entre o fônon LO e as excitações eletrônicas de uma única partícula e o acoplamento dos fônons LO com os campos macroscópicos de despolarização das excitações eletrônicas inter-subbandas. Foi mostrado que é a interação Fröhlich a responsável pelo acoplamento de Fano. Devido à origem auto-consistente do espectro de energias eletrônicas nestas SL's, verificou-se que a ressonância da interferência de Fano depende fortemente tanto da densidade eletrônica, quanto da energia de excitação.

(CNPq)

## FOTOLUMINESCÊNCIA RESOLVIDA NO TEMPO EM PONTOS QUÂNTICOS DE CdTe

*M. L. Redigolo, A.M. de Paula, L.C. Barbosa, C.L. Cesar e C.H. de Brito Cruz*  
Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas, SP

*Palavras-Chave:* fotoluminescência, CdTe, pontos quânticos

Nos últimos anos, os vidros dopados com microcristalitos (pontos quânticos) semicondutores vêm se destacando como materiais muito promissores para chaveamento óptico ou outros dispositivos fotônicos baseados em suas propriedades ópticas não-lineares e tempos de resposta ultra-rápidos. Vários estudos mostraram que além dos níveis de energia devido ao confinamento quântico tridimensional, estes materiais apresentam níveis de superfície ou traps. Medidas de absorção óptica com resolução temporal demonstraram que os portadores (elétrons e buracos) fotoexcitados nestes nanocristais decaem rapidamente (numa escala de tempo de femtossegundos) para os níveis de superfície e depois recombinam-se destes estados dando origem a fotoluminescências com longos tempos de decaimento. Esses tempos dependem muito da qualidade das amostras, devido à densidade dos níveis de superfície. Amostras com densidades altas de níveis de trap profundos apresentam tempos de decaimento muito longos, o que não é desejável para a utilização em dispositivos ópticos. Neste trabalho, apresentamos medidas do tempo de vida da fotoluminescência em função da temperatura da amostra. Estudamos várias séries de amostras crescidas com tempos e temperaturas de tratamento térmico diferentes. Este crescimento consiste de duas etapas, uma de nucleação (temperaturas em torno de 500 °C), quando as pequenas microestruturas cristalinas são formadas, e uma segunda (temperaturas em torno de 540 °C) quando os microcristalitos menores começam a crescer. Este tratamento térmico duplo produz amostras de melhor qualidade. As medidas de fotoluminescência foram feitas entre 13 K e 300 K, nos permitindo analisar diferentes mudanças nas bandas espectrais. Através da análise destas bandas determinamos a dependência do gap de energia com a temperatura. Além disso, observamos tempos de decaimento que dependem dos detalhes de crescimento das amostras.

## SINGLE -BAND MODEL FOR THE SPIN-ORBIT SPLITTING OF ELECTRONS IN III-V SEMICONDUCTOR ASYMMETRIC QUANTUM WELLS

*Erasmus A. de Andrada e Silva*

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE  
Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS  
CP 515 - São José dos Campos - SP - erasmo@las.inpe.br

*G.C. La Rocca*

Scuola Normale Superiore  
P. dei Cavalieri 7  
56100 Pisa, Italia

**Palavras-Chave:** asymmetric quantum wells, spin-orbit splitting, one-band model

A simple, but accurate, single-band envelope function approach, employing spin-dependent boundary conditions, is presented in order to describe the dispersion relation for conducting electrons in III-V semiconductor quantum wells. The effective Hamiltonian is obtained from a perturbation expansion of the eight-band *kp* Kane model projected into the conduction band space. The matching conditions are derived by integration across the interface. The so called Rashba spin-orbit splitting in the conduction subband of asymmetric quantum wells is calculated for different structures, namely heterojunctions and composition asymmetric heterostructures. The results of the single-band model are compared with the multi-band solution and are shown to be quite accurate within a large range of the structures parameters. It is shown that the splitting in AlAs/GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, for example, presents a maximum as a function of the well width. It is also shown that the splitting is bigger for the higher subbands. Results for graded composition asymmetric quantum wells with Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As and Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>Sb ternary compounds, showing large splittings, are also presented.

(CNPq, Brasil; INFN, Italia)

## RABI SPLITTING IN A MICROCAVITY GROWN ON A (311)A GaAs SUBSTRATE

*F.M.Matinaga, L.A.Cury, E.C.Valadares, M.V.B.Moreira, W.N.Rodrigues and  
A.G.de Oliveira, J.M.C.Vilela<sup>†</sup>, M.S.Andrade<sup>†</sup>, J.A.Shuss<sup>†</sup>*

Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas - Universidade Federal de Minas Gerais  
<sup>†</sup>Fundação Centro Tecnológico de Minas Gerais - CETEC, Belo Horizonte, MG.

**Palavras-Chave:** Quantum Well, Microcavity, Rabi Splitting

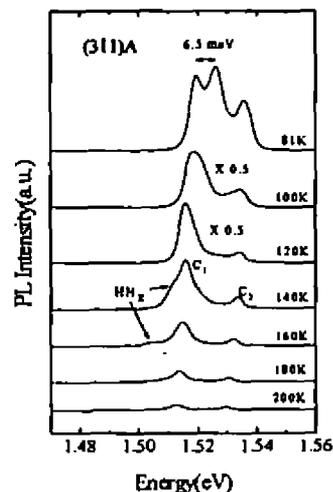
Rabi splitting in a microcavity grown on a (311)A GaAs substrate was observed for the first time using photoluminescence (PL). This splitting is 1.4 times larger than that observed in a similar structure grown on a (100) GaAs substrate<sup>1</sup>, in agreement with the expected three times larger binding energy of excitons confined in higher index quantum wells<sup>2</sup>. Our microcavity structure was grown by MBE and its good morphological quality was verified by atomic force microscopy (AFM). The one wavelength cavity consists of two AlAs/Al<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>As DBR mirrors (22 pairs above and 26.5 pairs below), and the active region is formed by three GaAs 100Å quantum wells sandwiched by two Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As spacer layers.

The PL characteristics of this microcavity were measured in the range 81K-200K, as shown in the figure. We observe clearly the evolution with temperature of the heavy hole exciton (HH<sub>x</sub>) emission line and two cavity modes (C<sub>1</sub> and C<sub>2</sub>). The HH<sub>x</sub> emission line shifted six times more than the cavity modes. The crossover of the HH<sub>x</sub> line with the C<sub>1</sub> cavity mode occurs around 100K, and a Rabi splitting of  $\Omega=6.5$  meV is observed at 81K.

The present study demonstrates unambiguously that PL can be used to observe Rabi splitting in semiconductor microcavities tuned by varying the temperature, in addition to the usual photorefectance and transmission measurements.

1-T.A. Fisher et al., Phys. Rev. B, 51, 2600 (1995).

2-R.Nötzel, N.N. Ledentsov, K. Ploog, Phys. Rev. B, 47, 1299 (1993).



## ESPECTRO DE POLARITON DE PLASMONS E PROPRIEDADES ÓPTICAS DE SUPER-REDE TIPO PERIOD-DOUBLING

*Manoel S. Vasconcelos e Eudenilson L. Albuquerque*

Departamento de Física  
Centro de Ciências Exatas, UFRN  
Campus Universitário, 59072-970 Natal-RN

*Palavras-chaves:* Super-redes, Period-Doubling, Matriz-transferência

Neste trabalho apresentamos o espectro de polariton de plasmons (modos de volume e superfície) como também o espectro óptico (reflectância e transmitância) em uma super-rede quasi-periódica, que obedece a sequência Period-Doubling. O sistema quasi-periódico de multi-camadas Period-Doubling é construído quando duas camadas de diferentes materiais A e B são dispostos de acordo com a seguinte relação de recorrência:

$$S_n = S_{n-1}S_{n-2}S_{n-2} \quad (n > 1)$$

com:  $S_0 = AB$ ;  $S_1 = S_0AA$

A maneira mais simples de considerar a super-rede tipo Period-Doubling consiste em posicioná-la na forma de um filme embebido no vácuo, com o objetivo de facilitar a medida experimental destes espectros. Usando o método da matriz-transferência, para simplificar a álgebra, é possível determinar-se a relação de dispersão para os polaritons de plasmons, assim como as expressões teóricas da reflectância e transmitância. É feito um exemplo numérico com: A = GaAs e B = SiO<sub>2</sub>, que nos mostra uma série de resultados interessantes destes espectros, dentre os quais destacamos:

- 1) Uma relação de dispersão com características fractais.
- 2) Uma rica estrutura de auto-similaridade com pontos de escalas  $\omega^*$ , no espectro óptico.
- 3) Estes pontos de escalas formam um conjunto de pontos que seguem uma equação de escala do tipo  $\omega^* = 71,51/2^{n-1}$  ( $n=1,2,\dots$ ).

## MAGNETIC-FIELD EFFECTS ON THE OPTICAL ABSORPTION SPECTRA ASSOCIATED WITH SHALLOW IMPURITIES IN QUANTUM WELLS

*L. H. M. Barbosa<sup>1</sup>, Andrea Latgé<sup>1</sup>, L. E. Oliveira<sup>2</sup>, and M. de Dios-Leyva<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Inst. de Física, Universidade Federal Fluminense, CP100093, 24001-970 Niterói-RJ, Brasil

<sup>2</sup>Inst. de Física, Universidade Estadual de Campinas, CP 6165, Campinas -SP, Brasil

<sup>3</sup>Depto. de Física, Universidade de Havana, San Lazaro y L, Vedado, 10400, Havana, Cuba

**Key words:** magnetic field, quantum wells, impurities

The effects of an applied magnetic field on the optical absorption spectra associated with transitions from shallow acceptor states to conduction subbands (or from valence subbands to shallow donor states) in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells are systematically studied, for the case of magnetic fields applied perpendicular to the heterostructure interfaces. The impurity-related absorption spectra are calculated within the effective-mass approximation and with a minimization procedure for evaluating donor and acceptor energies and envelope wave functions<sup>1,2</sup>. The distribution of donors or acceptors in the quantum well was assumed to be both homogeneous and on-center spike doped, and interactions between the impurities were neglected. We have studied in some detail the total transition probability per unit time associated with transitions between subbands and impurity bands, and considered different polarizations of the incident radiation. Finally, the theoretical impurity-related magnetoabsorption spectra are analyzed for various quantum well widths and applied magnetic fields. The magnetoabsorption lineshape presents features clearly associated to transitions involving different Landau magnetic levels.

<sup>1</sup>L. E. Oliveira and R. Pérez-Alvarez, Phys. Rev. B **40**, 10460 (1989); N. Porras-Montenegro, A. Latgé, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. **70**, 5555 (1991).

<sup>2</sup>A. Latgé, N. Porras-Montenegro, and L. E. Oliveira, Phys. Rev. B **51**, 13344 (1995)

## OSCILAÇÕES SHUBNIKOV-DE HAAS ÓPTICAS

*Ademir Ricart Alves*

DPF, Universidade Federal de Viçosa, 36570-000, Viçosa, MG

*Luiz Alberto Cury, Paulo Sérgio Soares Guimarães e Marcus Vinícius Baeta Moreira*

Dept. Física, ICEX, UFMG, CP 702, 30161-970, Belo Horizonte, MG

**Palavras-chave:** poços quânticos, fotoluminescência, Shubnikov-de Haas

Oscilações similares ao efeito Shubnikov-de Haas (SdH) têm sido observadas na intensidade de fotoluminescência ( $I_{PL}$ ) em função do campo magnético, em poços quânticos assimétricos nos quais a segunda sub-banda de energia ( $e_2$ ) se encontra próxima da energia de Fermi ( $E_F$ ) do sistema. Existem controvérsias a respeito da origem dessas oscilações Shubnikov-de Haas ópticas (OSdH)<sup>1-3</sup>. Neste trabalho utilizamos medidas de magneto-óptica em campos magnéticos elevados (até 15 T) para estudar as OSdH em um poço quântico assimétrico de n-AlGaAs/InGaAs/GaAs com  $e_2$  em torno de 5 meV acima de  $E_F$ .

Verificamos que as oscilações na intensidade da transição  $e_1$ - $h_1$  (da primeira sub-banda de energia eletrônica,  $e_1$ , para o primeiro nível de buracos,  $h_1$ ), estão em fase com as oscilações elétricas (SdH) e em anti-fase com as oscilações OSdH em  $e_2$ - $h_1$ . Isso mostra que as OSdH na  $I_{PL}$  das transições  $e_1$ - $h_1$  e  $e_2$ - $h_1$  são competitivas. Observamos ainda que os máximos em  $e_1$ - $h_1$  ocorrem quando um nível de Landau da sub-banda  $e_1$  passa por  $E_F$  a medida que o campo magnético é variado.

Concluímos que a origem das OSdH se deve a um reforço na interação entre os buracos de  $h_1$  e os elétrons em  $e_1$  quando um nível de Landau da sub-banda  $e_1$  passa por  $E_F$ . Devido ao número relativamente baixo de buracos fotoexcitados, disputados pelos elétrons de  $e_1$  e  $e_2$ , o aumento na intensidade da transição  $e_1$ - $h_1$  deve ser acompanhado por uma diminuição na intensidade da transição  $e_2$ - $h_1$ .

(FAPEMIG, CAPES, CNPq)

<sup>1</sup> W. Chen et al., Phys. Rev. Lett. **64**, 2434 (1990).

<sup>2</sup> M. S. Skolnick et al., Phys. Rev. Lett. **66**, 963 (1991).

<sup>3</sup> B. B. Goldberg et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 641 (1990).

## OBSERVATION OF THE PLATEAU-BEHAVIOR OF VERTICAL TRANSPORT IN GaAs $\delta$ DOPING SLs BY RAMAN STUDIES

*S.C.P. Rodrigues, L.M.R. Scolfaro, R. Enderlein, A.A. Quivy, A.P. Lima and J.R. Leite*

*Universidade de São Paulo, 05389-970 São Paulo, S.P., Brazil*

*and*

*Yu.A. Pusep, S.W. da Silva, M.T.O. Silva, J.C. Galzerani*

*Universidade Federal de São Carlos, 13565-905, São Carlos, S.P., Brazil*

**Palavras-Chave:** delta-doping superlattices, plasma frequency, transport

Semiconductor superlattices (SLs) are unique solid state systems because of their strongly anisotropic band structure: wide subbands parallel to the layers coexist with flat minibands perpendicular to the layers. A particular effect of this anisotropy is the plateau-like behavior of the vertical electric conductivity as a function of the Fermi level. As long as the Fermi level moves through a miniband, the conductivity rises, and if it crosses a minigap, the conductivity stays constant. This applies in particular, to the imaginary part of the vertical conductivity whose Fermi level dependence is determined by the plasma frequency. The plateau-effect can, thus, be studied by means of the vertical plasma frequency. In compositional SLs the observation of the plateau-behavior is hindered by the fact that, due to the repelling Coulomb forces, hardly more than the first two minibands can be occupied with carries. This limitation does not exist in  $\delta$ -doping SLs; usually several minibands are occupied. A series of  $\delta$ -doping SLs made of GaAs and Si as dopants are grown by MBE. For determining the transverse plasma frequencies of samples, Raman measurements are performed in backscattering geometry and  $z(\infty)\bar{z}$  polarization. The plot of the vertical-plasma-frequency versus sheet-doping-concentration curve is calculated using a standard self-consistent band structure calculation procedure. The theoretical curve is in remarkable good agreement with the measured one. Thus, for the first time, the predicted plateau-like behavior of vertical transport in SLs with respect to the Fermi level position has been observed experimentally.

## LATTICES OF ARTIFICIAL SCATTERERS IN A HIGH MAGNETIC FIELD

G.M. Gusev,<sup>1</sup> U. Gennser,<sup>2</sup> X. Kleber,<sup>2</sup> D.K. Maude,<sup>2</sup> J.C. Portal,<sup>2</sup> D.I. Lubyshev,<sup>1</sup>  
P. Basmaji,<sup>1</sup> M. P.A.da Silva,<sup>1</sup> J.C. Rossi,<sup>3</sup> and Yu.V. Nastaushev.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física de São Carlos, 13560-970, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

<sup>2</sup>CNRS-LCMI, F-38042, Grenoble and INSA-Toulouse, 31077, France

<sup>3</sup>Universidade Federal de São Carlos, Brazil

**Keywords :** quantum Hall effect, antidots

Percolation along the contours of the disordered potential plays a large role in our current understanding of the two-dimensional electron gas in the quantum Hall regime. In the network model one-dimensional transmission lines are connected by the saddle points, where scattering or tunneling between the lines can occur. Experimentally it would be desirable to have a model system for the investigation of the scattering process in the quantum Hall effect regime, on a regular network of electron channels. The antidot lattice, where the smooth impurity potential is substituted by the imposed, regular antidot potential, offers such a possibility. In the gate-controlled antidot lattice the resistance is determined by the number of one-dimensional channels, which passes the bottleneck and by scattering when electrons move in the space between four antidots (quantum dot). Here we present measurements on such a lattice in a high magnetic field, and show that it can help us gain insight into the scattering mechanisms of a network of edge states. The region between antidots can be squeezed by the gate voltage, regulating the number of conducting channels and, consequently, the resistance. This makes the system suitable also for the study of Hall liquid - insulator transitions. It allows us to probe deep into the phase-space of the transition at both low and high magnetic fields. It is shown, that the transition occurs when the longitudinal and Hall conductivities are equal to each other.

(CNPq and FAPESP)

## ELECTRONIC PROPERTIES OF AN APERIODIC SEMICONDUCTOR HETEROSTRUCTURE

*Diógenes Bosquetti, Pierre Basmaji, Oscar Hipólito and Euclides Marega Jr.*  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP

*Palavras-Chave:* aperiodic heterostructure, electric field induces delocalization

One of the fundamental properties of a periodic heterostructures that makes it useful in electronic and optical applications is the nature of electronic states, i.e., the wave function extended over entire system with the formation of mini-bands analog as formed in bulk materials. The mini-band width depends of the coupling degree between the eigen-states related to the system parameters such as: barrier thickness, effective mass and the applied external field. The application of an external field in a periodic system leads to a host of interesting effects related to the transition between extended to localized quantum states of the system. By the application of the field along the growth axis the mini-bands breaks under the field in to a Stark-ladder of states whose wave functions gradually lose the extended behavior.

In this work, we observed a contrary effect of an external field when applied in an aperiodic semiconductor heterostructure, i.e., the field induce delocalization in electronic states and a mini-band formation. Using the Split-Operator method we simulated an aperiodic heterostructure which consist of a sequence of alternating layers of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0.1 ≤ x ≤ 1) which the thickness of wells and barriers increase gradually in the structure. The symmetry breaking at zero applied external field induce a localization of the electronic wave functions, increasing the coupling and the system properties becomes to a superlattice regime near a specific field (which depends on the parameters of the system). At this field, the mini-band width have the minimum value and the Bloch like oscillations have the maximum amplitude. This system open the possibility to obtain a new conception of design in semiconductor devices possible applied to optical-modulators extremely sensitive to low external fields.

( CNPq - FINEP - FAPESP )

## Efeitos de temperatura e de muitos corpos no espectro de magneto-absorção de sistemas bi-dimensionais dopados com uma modulação lateral periódica

M. Tavares<sup>1,2</sup>, C. Tejedor<sup>2</sup> G.E. Marques<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP 13565-905, Brazil.

<sup>2</sup> Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, Madrid 28049, Spain.

*Palavras-Chaves:* Absorção , Muitos Corpos e Temperatura

Recentemente sistemas bi-dimensionais dopados sob ação de campo magnético perpendicular e de um fraco potencial periódico modulador em uma das direções livres do gás, vêm sido de grande interesse tanto no ponto de vista experimental quanto teórico. Em particular, a variação dos espectros óticos em relação à intensidade do campo magnético, bem como efeitos de temperatura e propriedades de muitos corpos em ditos sistemas, têm motivado um grande número de trabalhos teóricos. Usamos neste trabalho, portanto, o método de Mahan-Nozières-De Dominicis (MND) à temperatura finita, para tratar as excitações coletivas em espectros óticos de tais sistemas. Tal método, originalmente usado no problema de transições de raios X, está baseado no cálculo de valor esperado de operadores de corrente entre estados  $|\phi\rangle$  de muitos corpos bem definidos. Nossos resultados mostram que tanto a posição do buraco em relação ao potencial periódico, como efeitos de temperatura e de muitos corpos, têm relevada importância na forma e na energia de ressonância dos picos do espectro de absorção

( CAPES - CNPq )

## Transition from 3-Dimensional to 2-Dimensional magneto-excitons

Ivan F. Costa, José A. Brum

IFGW- DFESCM, Universidade Estadual de Campinas, 13081-970 Campinas (SP), Brazil

*Palavras Chave:* exciton, quantum-well, magnetic field

We present the results of the calculation of the exciton states in wide or shallow quantum wells in the presence of a magnetic field. Two configurations are considered for the field: parallel and perpendicular to the interface. A center-of-mass quantization of the 3D exciton is used to describe the effects of the QW barriers. As the quantum well width decreases or depth increases, the breaking of translational invariance leads to 2D-like exciton. In this case, the exciton wave function under goes a deformation and the relative motion mixes with the center-of-mass motion. The main effect of the magnetic field perpendicular to the interface is to modify the 3D exciton size and it can be used to monitor the transition from 3D to 2D systems and its effects on the exciton states. For a magnetic field parallel to the interface, there is an extra coupling between the center-of-mass and the relative motions.

Another important characteristic of quasi-2D systems is the coupling among the heavy- and light-hole excitons. A bulk valence mass is a good approximation for the 3D limit. For 2D systems, the mass reversal dominates the in-plane kinetics. We are in an intermediate situation and the importance of taking into account the hole mixing depends on the combination of several parameters as the barrier width/height and the strength of the magnetic field.

We study the exciton states focusing on the mixing of the relative and center-of-mass motion and the heavy- and light-holes mixing for various well widths and intensity of magnetic field, from very shallow to deep quantum wells, to visualize the change of dimensionality of the system. Our results are in good agreement with the available experimental results.

## EFEITOS DE CONFINAMENTO QUÂNTICO NOS FÔNONS ÓPTICOS EM NANOCRISTAIS DE CdTe

Ana M. de Paula, L. C. Barbosa, C. H. B. Cruz, O. L. Alves\* J. A. Sanjurjo e C. L. Cesar  
Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas SP

\*Instituto de Química, Caixa Postal 6154

*Palavras-Chave:* efeitos de confinamento, fônons ópticos, pontos quânticos

Os efeitos de confinamento quântico nas propriedades ópticas de pontos quânticos em vidros dopados com semicondutores é atualmente assunto de inúmeros trabalhos de pesquisa. Este interesse se deve ao fato de que esses materiais apresentam propriedades ópticas não-lineares que os caracterizam como candidatos potenciais para aplicações em dispositivos ópticos. Neste trabalho apresentamos medidas de espalhamento Raman em nanocristais de CdTe que mostram claramente os efeitos de confinamento quântico nos fônons ópticos em função do tamanho do ponto quântico. Os resultados são obtidos variando o comprimento de onda do laser de excitação para obter ressonância com pontos quânticos de tamanhos diferentes dentro da distribuição de tamanhos existente nos vidros dopados. Observamos fônons longitudinais ópticos e fônons de superfície. Mostramos que a intensidade do espalhamento devido aos fônons de superfície aumenta para pontos quânticos menores. Observamos ainda que o acoplamento elétron-fônon diminui à medida que diminui o raio do ponto quântico. As amostras foram preparadas fazendo a fusão dos componentes da matriz vítrea SiO<sub>2</sub>, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>O e ZnO com os dopantes CdO e telúrio metálico. Os nanocristais são produzidos por tratamento térmico. Estudamos uma amostra tratada à 580 °C por 25 min. O raio médio dos nanocristais obtidos do espectro de absorção e de um modelo k·p é de 3.6 nm [C. R. M. de Oliveira *et al.*, Appl. Phys. Lett. 66, 439 (1995)], com uma dispersão de tamanho de 10%.

## OPTICAL ANISOTROPY IN (311) InGaAs/GaAs QUANTUM WELLS

A. A. Ribeiro, G. A. Narvaez, E. Ribeiro, F. Cerdeira, F. E. G. Guimarães\*, D. Lubyshev\* and P. Basmaji\*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Unicamp,

\* Instituto de Física, USP-São Carlos

*Palavras-Chave:* anisotropy, quantum wells, piezo-eletric field

Quantum wells and superlattices grown on (311) GaAs substrates offer the possibility of obtaining lateral confinement through the spontaneous formation of quantum wires during growth. Lateral confinement can be diagnosed by the appearance of optical anisotropy in the reflectivity and absorption spectra. An anisotropy parameter can be defined relating the relative intensities of peaks associated with the optical transitions to the conduction band from the heavy(hh) and light hole bands for light polarized parallel or perpendicular to the (-233) quantum wire direction. This parameter,  $\gamma = 1 - R(011)/R(-233)$  with  $R = I(hh)/I(lh)$ , is identically zero for bulk materials or for QW's deposited on substrates oriented along a high symmetry axis such as the usual (100). On the other hand, quantum wires or very thin non-corrugated quantum wells yield  $\gamma > 0$ , with  $\gamma$  increasing as the QW-width decreases. We report here modulated reflectance and transmission measurements performed on a series of non-corrugated InGaAs/GaAs QW's deposited by MBE on (311) substrates. In these samples three sources of anisotropy are possible: a) the one associated to confinement along the growth direction as a consequence of the anisotropy of the valence band, b) a second one which results from the wave function mixing provoked by the strong bi-axial strain and c) a third one associated with the in-plane component of the piezo-electric field, which is also a consequence of bi-axial strain. Of these causes only the first should depend on the well thickness (d) while the others could alter even the sign of  $\gamma$ , leading to  $\gamma < 0$  in some cases. Results on samples with  $d = 40 \text{ \AA}$  and  $d = 100 \text{ \AA}$  indicate that the strain-related anisotropy is dominant and further indicate that interface roughness blurs the observed anisotropy effects. Comparison between the results of both samples allows to estimate the importance of each mechanism in determining the value of  $\gamma$ .

(FINEP, FAPESP, CNPq)

## CARRIER SPIN-POLARIZATION NEAR THE FERMI LEVEL IN N-MODULATION DOPED AlGaAs/InGaAs/GaAs QUANTUM WELL

A.L.C. Triques<sup>1</sup>, F. Iikawa<sup>1</sup>, M. Z. Maialle<sup>2</sup>, J.A. Brum<sup>1</sup>, R.G. Pereira<sup>1</sup>, and G. Borghs<sup>3</sup>

<sup>1</sup>- IFGW-UNICAMP, C.P.:6165, 13083-970 Campinas-SP, Brazil

<sup>2</sup>- DFFA-Universidade São Francisco, 13251-900 Itatiba-SP, Brazil

<sup>3</sup>- IMEC, Kapeldreef 75, B-3001, Leuven, Belgium

*Palavras-chaves:* spin-polarization, 2D-electron gas, quantum well

We present CW spin-polarization measurements in n-type modulation doped Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As/In<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As/GaAs strained layer single quantum well (QW). The QW shows a high two-dimensional (2D) electron gas density ( $N_{2D} \sim 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) and the Fermi level is near the second subband which is marginally occupied. We investigated the degree of polarization as a function of excitation and detection energies using low temperature photoluminescence (PL) and photoluminescence excitation (PLE) techniques with circular polarized light. The PL spectra show two peaks corresponding to the transitions from the 1st and 2nd electron subbands to the 1st heavy hole one. We observe a strong spin polarization for excitation energies slightly above the 2nd subband. The polarization decreases for higher excitation energies. This result is mainly attributed to heavy hole polarization. Since the light- and heavy-hole subbands are well separated in energy in this system, the hole mixing is weak, making it difficult for the hole to flip its spin. A striking feature in our results is the higher degree of polarization observed when the PL is detected near the Fermi energy. In the 1st subband the electrons are unpolarized due to the high 2D electron density. The 2nd subband, however, is slightly occupied. Therefore, this increase of polarization is an evidence that the electrons in the 2nd subband remain polarized and are not affected by the presence of the electron gas in the 1st subband. This is a very interesting system for spin-polarization investigation since it includes simultaneously two different situations: hole spin-polarization in the presence of a high electron density and both hole and electron spin-polarization for low electron density.

(FAPESP, FINEP, CNPq-PADCT)

## FAR-INFRARED ABSORPTION SPECTRA OF DOPED QUANTUM WELLS UNDER EXTERNAL FIELDS

F. J. Ribeiro<sup>(1)</sup>, A. Latgé<sup>(1)</sup>, and L. E. Oliveira<sup>(2)</sup>

(1) Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

(2) Instituto de Física - Universidade Estadual de Campinas

*Palavras-Chave:* quantum well, absorption spectra, electric and magnetic fields

Far infrared magneto spectroscopic techniques have allowed experimental analysis of the effects of magnetic and electric fields on the confined impurities in selectively-donor doped GaAs-GaAlAs quantum wells. Theoretical calculations of 1s-2p<sub>1/2</sub> intradonor transition energies, on the other hand, have showed that a detailed understanding of the problem is only possible taking into account a proper consideration of the impurity-doping profile together with a calculation of the intradonor absorption coefficients. By following a variational treatment, within the effective-mass approximation, we have calculated the absorption spectra related to 1s-2p<sub>1/2</sub> intradonor transitions in a doped quantum well under the presence of electric and magnetic fields, both applied perpendicular to the interfaces of the heterostructure. A two-parameter envelope hydrogenic-like wave function was adopted for the donor states in order to better allow for the distortions caused by the electric and magnetic fields. The corresponding impurity profile of the experiments was taken into consideration in the theoretical description of the doped quantum well. A detailed study of the intradonor absorption spectra as functions of the photon energy, has shown that the structure of the absorption spectra is very sensitive to the value of the applied electric field presenting well defined peaks or broad structures in different ranges of the electric field values. It is unambiguously shown that the absorption spectra must be evaluated for a correct quantitative understanding of the magneto spectroscopic data and that the choice of the trial wave-function is essential for a better description of the problem.

(CNPq)

## SOLUÇÃO NÚMERICA PARA O MODELO DE COMUTAÇÃO UNIDIMENSIONAL APLICADO A UMA ESTRUTURA HEMT

L. G. O. Messias, P. Basmaji e E. Marega Jr.  
Departamento de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP  
CP 369, 13960-970 São Carlos, SP, Brazil

**Palavras-Chave:** Semicondutor, transistor, HEMT

Um dos mais expressivos resultados obtidos a nível do desenvolvimento de dispositivos a base de heteroestruturas semicondutoras do grupo III-V é o transistor de alta mobilidade eletrônica (HEMT), vastamente usado em circuitos optoeletrônicos e circuitos de alto desempenho. No presente momento o transistor a base da estrutura HEMT é o dispositivo semicondutor de três terminais de mais alta velocidade de comutação no mercado.

Apresentamos neste trabalho um modelo para o estudo de transistores baseados em estruturas do tipo HEMT. O modelo de comutação unidimensional<sup>(1)</sup>, apresenta resultados para o caso intrínseco e extrínseco, onde leva-se em conta as resistências e capacitâncias parasitárias do sistema. Aplicamos este modelo para a estrutura desejada, calculando-se exatamente o potencial utilizando o cálculo auto-consistente. A partir disto foi determinada a transcondutância e a velocidade (calculada ponto a ponto) dos portadores como função da densidade de destes e da temperatura. Para os casos intrínseco e extrínseco o modelo foi comparado com um dispositivo real produzido nos laboratórios de crescimento epitaxial do IFSC. A partir deste modelo é possível prever o comportamento de dispositivos ultra-rápidos e compreender fenômenos físicos com um baixo custo computacional.

(1) Modelo Analítico de Comutação do transistor HEMT, A. Olmos et al, VIII Congresso da Sociedade Brasileira de Microeletrônica - 1993, pag. V13-V18.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## MODOS VIBRACIONAIS DE SUPER-REDES CRESCIDAS NA DIREÇÃO [0 0 1]

R. F. de Ávila e H. W. L. Alves  
Depto. de Ciências Naturais - FUNREI, São João del Rei - MG

**Palavras-Chave:** dinâmica de redes, super-redes, semicondutores

As super-redes tem atraído bastante atenção da comunidade científica, pois são inúmeras as aplicações tecnológicas que estes compostos podem oferecer, propiciando a criação de novos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos. O interesse nas propriedades vibracionais de super-redes semicondutoras vem aumentando devido à grande quantidade de informação estrutural que pode ser adquirida experimentalmente, cuja análise mais apurada facilita o crescimento mais controlado destes compostos. Neste trabalho, calculamos a relação de dispersão dos modos vibracionais, tanto longitudinais como transversais, para as super-redes de  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n$  e  $(\text{GaP})_m(\text{InP})_n$ , crescidas na direção [0 0 1]. Para tal, usamos o modelo das constantes de forças interplanares. Em nosso algoritmo, que inclui até as interações de segundos planos vizinhos, os parâmetros utilizados para o cálculo da matriz dinâmica da super-rede foram determinados, através de ajuste por mínimos quadrados, usando a relação de dispersão dos fônons de cada material, também aproximando as interações até segundos vizinhos. Qualitativamente, os nossos resultados descrevem todas as evidências experimentais observadas, ou seja, que há o desdobramento dos modos acústicos e que há o confinamento dos modos óticos, que são característicos nestes compostos. E, quantitativamente, os valores obtidos para as frequências dos fônons no ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin, estão em boa concordância com os dados experimentais disponíveis na literatura. E, por fim, especulamos, a partir dos nossos resultados, quais seriam as principais características observadas para a dinâmica de redes em poços quânticos feitos com estes materiais.

(FAPEMIG, CNPq)

## LASER-DRESSED COULOMB POTENTIAL OF A CONFINED HYDROGENIC IMPURITY IN A QUANTUM WELL WIRE

A.L.A.FONSECA, Fanyao Qu and A.C.NUNES  
Universidade de Brasília, Departamento de Física  
70910-900 Brasília(DF)-Brazil

The influence of an intense high-frequency laser field on the binding energy of a hydrogenic donor impurity in a quantum well wire (QWW) that is made of GaAs, has a circular cross-section, and is surrounded by  $Ga_{1-x}Al_xAs$ , is presented by making use of a nonperturbative theory and the variational approach [1]. By making a unitary transformation to the one-electron Schrödinger equation in the presence of the laser field, we transfer the time-dependence of the kinetic energy to the potential so that in the new representation the electron is acted upon by a "laser-dressed" potential with cylindrical symmetry. The Coulomb interaction will thus depend upon the laser field strength as well as on the effective dimensionality of the wire which can be changed by changing the wire radius. Calculations were made for the binding energy of a hydrogenic impurity located at the symmetry axis of the wire and its dependence on the field strength was analysed and compared with the results found for bulk [1] and quasi-two-dimensional [2] cases.

1. A.L.A.Fonseca, M.A.Amato and A.C.Nunes, Phys. Stat. Sol. B 186, K57 (1994)
2. Fanyao Qu, A.L.A.Fonseca, P.C.Morais and A.C.Nunes, Phys. Stat. Sol. B (submitted for publication, march 1996).

(CAPES, CNPQ)

## CONTROLE ÓPTICO DA DENSIDADE BIDIMENSIONAL DE PORTADORES EM UM POÇO QUÂNTICO ASSIMÉTRICO

Jory M. Geraldo(\*), Eduardo de C. Valadares, Alaor S. Chaves e Alfredo G. de Oliveira  
Universidade Federal de Ouro Preto(\*), Universidade Federal de Minas Gerais

*Palavras-chave:* poço-quântico, fotoluminescência, transferência de carga

Um novo fenômeno de transferência de carga no espaço real, proposto por Chaves e colaboradores [1], tem-se mostrado importante na investigação de propriedades físicas de gases de altas densidades de partículas (plasma elétron-buraco), sendo também possível a sua aplicação em optoeletrônica quântica. O meio ativo da estrutura investigada é um poço quântico assimétrico, imerso em uma heteroestrutura de GaAs-AlGaAs crescida pela técnica de epitaxia por feixe molecular. Variando a intensidade de luz incidente na amostra ( $I_{Luz}$ ) induz-se uma acentuada redução na densidade bidimensional de portadores no poço quântico, razão pela qual a estrutura pode funcionar como um transistor eletroóptico. Esta redução na densidade de portadores é monitorada observando a variação na energia de recombinação do pico de fotoluminescência correspondente à transição entre os primeiros níveis de elétron e buraco, à medida que variamos  $I_{Luz}$ . Visando a aplicação da estrutura em dispositivos optoeletrônicos, estudamos amostras crescidas nas direções cristalinas (311A) e (311B). As amostras eram imersas em hélio líquido no estado superfluido (temperatura menor que 2,0 K) e em nitrogênio líquido (77 K) na tentativa de observar o fenômeno em temperaturas mais elevadas. A análise dos resultados mostrou que mesmo a 77 K, no sistema GaAs-AlGaAs, é possível observar a redução na densidade de portadores em ambos os casos: população de elétrons (311A) e buracos (311B) no poço. Entretanto, observamos que o gás de elétrons necessita de menores intensidades de luz para sua completa aniquilação, quando comparado com o gás de buracos. Isto implica que o gás de elétrons seria mais recomendado para aplicações que envolvam baixas intensidades de luz e o contrário para o gás de buracos. Por outro lado o gás de buracos é mais sensível à variação de  $I_{Luz}$ , sendo totalmente aniquilado para menores variações na intensidade de luz quando comparado com o gás de elétrons. Acreditamos que a grande diferença entre as massas efetivas de elétrons e buracos explica satisfatoriamente estes efeitos. Um estudo sistemático da largura de linha nos espectros de fotoluminescência mostra ainda o preenchimento e esvaziamento dos níveis de elétrons e buracos no poço quântico.

(CNPq, FINEP, CAPES)

## DETERMINAÇÃO DAS MOBILIDADES DE TRANSPORTE EM AMOSTRAS $\delta$ -DOPADAS

*Luiz Carlos Donizetti Gonçalves, André Bohomoletz Henriques e Nei Fernandes de Oliveira Jr.*  
Instituto de Física da USP - Depto. de Física de Materiais  
*Patricia Lustoza de Souza e Boris Yavich*  
Centro de Estudos em Telecomunicações, Pontifícia Universidade Católica - RJ

*Palavras-Chave:* delta doping, semicondutores, estrutura eletrônica

O confinamento bi-dimensional dos portadores em amostras  $\delta$ -dopadas tem origem na distribuição quasi-planar das impurezas depositadas no material hospedeiro. A quantização resultante deste confinamento, típica de sistemas bi-dimensionais, dá origem a diversas mini-bandas com localizações espaciais distintas. Essas populações, portanto, apresentam mobilidades quânticas e de transporte distintas entre si devido às diferentes sobreposições espaciais de suas funções de onda com as impurezas. As populações e suas respectivas mobilidades quânticas podem ser determinadas experimentalmente pela análise espectral das oscilações de Shubnikov-de Haas. A determinação experimental das mobilidades individuais de transporte pode ser feita a partir da análise do fundo magnetoresistivo clássico no qual as oscilações Shubnikov-de Haas estão superpostas. Para que sejam determinadas as mobilidades de transporte, ao contrário do que é exigido para a determinação das mobilidades quânticas, é necessário o conhecimento das componentes do tensor de resistividade e de seus valores absolutos em função do campo magnético, o que em geral exige um preparo especial das amostras envolvidas no que diz respeito aos contatos.

Determinamos neste trabalho as mobilidades de transporte em amostras de geometria quadrada com quatro contatos. A partir de simulações numéricas, o efeito da não localização dos contatos na periferia da amostra e da não puntualidade dos mesmos para a determinação das componentes do tensor de resistividade é quantificado. São obtidas as correções, associadas a essa geometria, para essas componentes. As mobilidades de transporte obtidas são apresentadas de modo conveniente com o auxílio do espectro de mobilidade, sendo o resultado independente das particularidades da relação de dispersão da estrutura de bandas, inclusive efeitos de não parabolicidade.

(FAPESP, CAPES, CNPq)

## PHOTOREFLECTANCE SPECTRA FROM GaAlAs/GaAs HEMTS

*J. A. N. T. Soares<sup>1</sup>, R. Enderlein<sup>1</sup>, J. R. Leite<sup>1</sup>, and M. Saito<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física da Universidade de São Paulo

<sup>2</sup>Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

R. do Matão, travessa R, 187 - 05508-970 - São Paulo - SP

*Palavras-Chave:* photoreflectance, hemt, 2deg

Recently, semiconductor device structures have been studied by means of photoreflectance (PR) spectroscopy. In this work we present an experimental and theoretical PR study of high electron mobility transistor (HEMT) structures. As in previous investigations, we find two types of oscillations in the PR spectra of these structures, one type with large period, which can be interpreted in terms of the Franz-Keldysh effect, and another type with short period whose origin is controversial thus far. One possible explanation for this type of oscillations is that they are due to optical transitions from the valence band to the 2D electron states of the HEMT. To check the validity of this interpretation we have performed PR measurements in the presence of a gate voltage, which allows us to change the position of the Fermi level with respect of the quantum well (QW) bottom. This change should show up in a rigid shift of the short period oscillations if they really were due to the 2D states of the QW. In our measurements we in fact observe such a shift: the small period structure moves down to lower energies if, in the measured region of the sample, the Fermi level is lowered by the applied gate voltage. This provides evidence of the 2D character of the short period oscillations observed in the PR spectra of HEMT structures.

## ULTRAFAST DECAY OF PHOTOINDUCED TRANSMISSION CHANGES IN CdTe QUANTUM DOTS DOPED GLASSES

Ricardo E. Marotti, Pedro A. M. Rodrigues, Carlos H. Brito Cruz  
Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física, UNICAMP

*Palavras-Chave:* quantum-dots, ultrafast relaxation.

The response times of optical nonlinearities in quantum dots (QDs) doped glasses (DGs) are important since both: they are a basic issue for the use of QDs DGs as optical devices; and they may contain information about the intrinsic properties of zero-dimensional systems. Here we present a study of the photoinduced changes in the transmission ( $\Delta T/T$ ) of CdTe QDs DGs. We use a pump-and-probe setup, where the pump pulse ( $\sim 150$  fs) is centered at 614 nm (2.02 eV), and the probe pulse ( $\sim 30$  fs) is a white continuum (580 - 650 nm). After passing through the sample, the probe pulse is spectrally filtered; and by measuring its transmission, with and without the presence of the pump, we record  $\Delta T/T$  as a function of the delay time between pump and probe. We estimate that the pump pulse excite  $\sim 0.5$  electrons per QD in our experiment. The samples have average radius  $R \sim 35$  Å and size dispersion of 5 - 10 %. Their linear absorption spectra show a peak at  $\sim 2.0$  eV (optical transition between the first confined states) and shoulders at higher energies (higher optical transitions). Their photoluminescence (PL) spectra show only the band edge peak, the position of which correlates very well with the first absorption peak. The broad band at lower energy, usually observed for QDs DGs and attributed to deep traps, was not observed in these samples [1]. The  $\Delta T/T$  signal is very similar for the samples studied. It shows a bleaching that has a fast exponential decay for delays less than 5 ps. After that, the decay is much slower and within our delay range it remains approximately constant ( $\sim 30\%$  of the maximum). The time constant of the fast decay is 1.2 - 2.0 ps for all samples. These decay constants are 3 - 4 times greater than the ones measured for samples which show a prominent deep trap PL band. Our results corroborate the assignment of deep traps as responsible for the fast decay of  $\Delta T/T$  in QDs DGs and suggests that our samples have a low density of such states.

[1] Y. Liu et al., *Journal of Materials Science Letters* 14, 635 (1995).

(CAPES, CNPq, FAPESP)

## AMPLIFICATION OF INTERFACE OPTICAL PHONONS IN GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As QUANTUM WELL SYSTEMS UNDER TWO LASER FIELDS.

W.P. dos Santos, A.L.A.Fonseca, and A.C.Nunes  
Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília, D.F.

The amplification of the interface optical phonon population in quantum well systems under two laser radiation fields is considered in the present work. It is found that amplification of interface optical phonons obtains under two necessary conditions. Firstly the parallel component of the phonon wavevector is confined to certain interval of values and second is that the strengths of the external laser fields has to exceed certain threshold values. The rate of change of the optical phonon population depends on the frequencies of the interface phonon modes, the external fields parameters, carrier density and material parameters, respectively. Numerical results are shown and discussed.

## EXPERIMENTAL AND NUMERICALLY SIMULATED RAMAN SCATTERING IN PHOTOLUMINESCENT POROUS SILICON

*G. A. Narvaez, E. Ribeiro, F. Cerdeira, D. M. Soares, and O. Teshke*

*Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Unicamp-SP*  
*Palavras-Chave: Porous Silicon, nanostructures, Raman scattering*

Recent Transmission Electron Microscopy and Photoluminescence studies suggest that porous silicon can be obtained in two distinct morphologies<sup>1</sup>. The first one is composed of isolated cylindrical nanocrystals and the second of an interconnected network of Si crystallites. In both cases the size of the particles is similar, but the connectivity would have a decisive effect on the Photoluminescence efficiency, where the stronger luminescence is exhibited by the samples composed of isolated nanocrystals. In this paper we report on the Raman spectra of both types of structures and analyse our results in the light of the predictions of models which describes isolated or interconnected nanostructures of crystalline Si. Initially we use a one-dimensional linear chain model to simulate the Raman spectra of both morphologies. The model shows that, although in both cases the one-phonon Si Raman line asymmetrically broadened in relation to that of the bulk Si, connected structures yield lineshapes that are broader and more asymmetric than those of isolated crystallites of the same size. This is precisely the trend observed in the experimental spectra for our samples. Next, three dimensional phenomenological models (variations of the model of Richter, Wang and Ley<sup>2</sup>) are used with boundary conditions which are compatible either with isolation or connectivity. The experimental lineshapes in both cases are best fitted with crystallites of cylindrical shape with ~5nm in average diameter and 3:1 length to diameter ratio. In order to explain the position of the Raman line, an expansive strain of  $\epsilon \sim 3 \cdot 10^{-3}$  is required. These conclusions are consistent with earlier work of Teshke *et al.*<sup>1</sup> as well as those of some other authors.

<sup>1</sup> O. Teshke, F. Alvarez, L. Tessler and M. U. Kleinke, *Appl. Phys. Lett.* 63, 1927 (1993)

<sup>2</sup> H. Richter, Z. P. Wang and L. Ley, *Solid State Commun.* 39, 625 (1981)

(CNPq)

## SUPERLATTICES IN THE PRESENCE OF EXTERNAL AC ELECTRIC FIELDS: FREQUENCY COMMENSURABILITY EFFECTS IN DRESSED MINIBANDS

*P. H. Rivera\* and P. A. Schulz*

*Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas  
Caixa Postal 6165  
13083-970 Campinas, SP Brazil*

**Keywords:** Superlattices, dressed minibands

The behaviour of electrons in semiconductor heterostructures, interacting with strong external AC fields, has been a subject of growing interest in the past few years. Recent developments in fabrication of semiconductor microstructures and tunable far-infrared lasers led to a new field of investigation, relating Quantum Optics and Solid State Physics. One of the striking predictions is the collapse of superlattices minibands<sup>1</sup>, as well as resonant tunneling suppression<sup>2</sup> for certain intensities of external AC fields. The evolution of dressed electronic states, starting from bare electronic states, gives rise to Brillouin Zones of quasienergies<sup>1</sup>. In the present work we describe an electronic miniband with a tight-binding model. The interaction with a laser field of a given frequency is described by a time-independent Hamiltonian which replaces the semiclassical time-dependent Hamiltonian<sup>3</sup>. The eigenvalues form a field-intensity dependent quasienergies spectrum. We extend the interaction to a simultaneous second strong external AC field. A time independent Hamiltonian<sup>3</sup> can be obtained if the frequencies of both fields are commensurate. The quasienergies spectra, as a function of field intensities, show a rich electronic localization behaviour (miniband collapsing). The quasienergies spectra for fixed field intensities as a function of frequency ratios show self-similar properties resembling Hofstadter-like spectra. The self similarity of the spectrum could be observed experimentally by means of third probe laser beam<sup>1</sup>. Finally the model is extended to a quantum dot in the presence of a magnetic field and a monochromatic intense AC field. Here the competition between the AC field and cyclotron frequencies leads to a modification in the fundamental state as a function of AC field intensity.

<sup>1</sup> Martin Holthaus and Daniel Hone; *Phys. Rev.* B47, 6499 (1993)

<sup>2</sup> Mathias Wagner; *Phys. Rev.* B49, 16544 (1994)

<sup>3</sup> J. H. Shirley; *Phys. Rev.* 138, B979 (1965)

\* (CAPES)

## DESAPARECIMENTO DE MINI-GAPS NOS MODOS ACÚSTICOS EM SUPER REDES Si/Ge DEVIDO MICRO-RUGOSIDADES

A. M. R. Teixeira, M. A. Araújo Silva, R. N. Costa Filho, G. A. Farias, e V. N. Freire  
Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030  
Campus do Pici, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brasil

*Palavras-Chave:* super redes Si/Ge, micro-rugosidades, mini-gaps acústicos.

Hetero-estruturas semicondutoras Si/Ge têm sido objeto de estudos tanto teóricos como experimentais. Há consenso da importância do papel das interfaces nas propriedades óticas, de transporte e nos fônons destas heteroestruturas. A espectroscopia Raman tem se mostrado bastante útil no estudo de fônons ao se considerar efeitos de micro-rugosidades e macro-rugosidades [1]. Neste trabalho nós mostramos o efeito de micro-rugosidades no espectro Raman de super redes de Si/Ge crescidas na direção [001], fazendo um estudo sistemático para vários graus de qualidade interfacial e levando-se em conta possíveis assimetrias no processo de fabricação dessas super redes. Este estudo é realizado utilizando-se o modelo da cadeia linear - com aproximação do cristal virtual para representação de ligas SiGe nas interfaces - e o modelo contínuo elástico, com o qual se considera a hipótese de uma variação interfacial da densidade da liga semicondutora SiGe. Observamos o desaparecimento de alguns mini-gaps previstos pelos modelos com interfaces abruptas, no centro (ponto  $\Gamma$ ) e borda (ponto X) da zona de Brillouin, para os modos acústicos devido a presença de micro-rugosidades. Constata-se também que as frequências mais elevadas dos fônons longitudinais acústicos (LA) são mais sensíveis à existência de assimetria interfacial e podem produzir deslocamentos consideráveis no ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin. Finalmente, obtém-se que os fônons longitudinais óticos (LO) Raman ativos são também influenciados pela existência de micro-rugosidades em super redes Si/Ge.

[1] S. de Gironcoli, E. Molinari, R. Schorer, and G. Abstreiter, Phys. Rev. B 48, 8959 (1993); R. Schorer, G. Abstreiter, S. de Gironcoli, E. Molinari, H. Kibbel, and H. Presting, Phys. Rev. B 49, 5406 (1993); M. A. Araújo Silva, E. Ribeiro, P. A. Schultz, F. Cerdeira, and J. C. Bean, aceito na Phys. Rev. B (1996).

## ANÁLISE ESTRUTURAL E TENSÃO MECÂNICA RESIDUAL EM HEXAMETILDISILAZANO POLIMERIZADO A PLASMA

*Brigitte Klaffke Dupouy, Cibele Maria Zerbinatti Ramalho, Rita de Cássia Domingos,  
Rogério Pinto Mota, Mauricio Antonio Algatti e Herman Jacobus Cornelis Voorwald*

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista,  
Campus de Guaratinguetá, 12500-000 Guaratinguetá, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* estrutura, hexametildisilazano, polímero

Os materiais poliméricos processados a plasma em atmosferas de baixa pressão de silozanos, constituem uma classe de material que apresentam características físicas e químicas notáveis sendo inertes ao ataque químico de ácidos e bases, livres de microburacos e altamente aderentes aos mais diversos substratos. Portanto, uma fonte alternativa para a proteção de superfícies sujeitas à corrosão. Utilizamos um reator de placas paralelas, alimentado por tensão contínua de 0 a 3 Kv negativos e evacuado por um sistema composto por bombas mecânica e difusora, para depositar filmes finos poliméricos a partir do vapor de hexametildisilazano (HMDSN), mantido nas pressões de 0,2 a 1,0 mbar. A análise da estrutura molecular destes polímeros foi feita por espectrofotometria infravermelha de transmissão, na região entre 5000 a 400  $\text{cm}^{-1}$  sobre o HMDSN polimerizado em substrato de Kbr. As principais ligações se encontram em 2954  $\text{cm}^{-1}$  e 2900  $\text{cm}^{-1}$  características de estiramentos assimétrico e simétrico C-H respectivamente; 2150  $\text{cm}^{-1}$ , estiramento Si-H; 1250  $\text{cm}^{-1}$  deformação simétrica em Si-CH<sub>3</sub>; 1035  $\text{cm}^{-1}$ , estiramento N-Si em Si<sub>4</sub>N<sub>2</sub>; 927  $\text{cm}^{-1}$  deformação simétrica C-H em Si-CH<sub>2</sub>. Sobre cada banda foi feito um estudo da evolução da absorção integrada das ligações em função dos parâmetros de deposição do filme. A análise por microscopia interferométrica revelou uma variação na espessura de 6000 a 2000 Å para os filmes crescidos nas pressões de 0,6 a 1,0 mbar sobre substratos de vidro. Medidas de tensão mecânica residual interna nestes polímeros crescidos sobre laminulas de vidro indicaram uma natureza compressiva para a tensão mecânica e sua evolução em função do tempo e dos parâmetros de deposição serão discutidos.

## COMPÓSITO PU/PZT: PROPOSTA DE UM NOVO SENSOR TÉRMICO

*Silvia T. S. Kagesawa e Walter Katsumi Sakamoto*  
Grupo de Polímeros - UNESP-ILHA SOLTEIRA

*Palavras Chave:* piroeletricidade - compósitos - sensor térmico

Compósitos polímero/cerâmica tem-se mostrado uma real alternativa, às densas cerâmicas, para aplicações como sensores. Características como resistência mecânica, baixa densidade e possibilidade de obtenção em variadas formas, são fatores extremamente interessantes para a indústria de dispositivos eletrônicos. Um dos fatores limitantes para o uso de compósitos polímero/cerâmica é, sem dúvida, a polarização. Neste sentido, procura-se utilizar uma matriz polimérica que suporte um campo elétrico, que permita a polarização da cerâmica. O uso da poliuretana (PU) derivada de óleo vegetal e o Titanato Zirconato de Chumbo (PZT), tem mostrado, em experimentos preliminares, que este compósito apresenta atividade piezo e piroelétrica que permite sua utilização como sensor. Esta atividade é devido ao PZT, o qual tem estrutura Perovskita e é composto de uma solução sólida de PbTiO<sub>3</sub> (Titanato de Chumbo) e PbZrO<sub>3</sub> (Zirconato de Chumbo). O compósito PU/PZT é obtido na forma de filme fino pelo método de centrifugação (spin-coating). Amostras de PU/PZT na proporção 89/11 em volume, apresenta um coeficiente piroelétrico da ordem de  $10^{-4} \text{ C.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ , o que é comparável com o compósito PZT/PVDF na proporção 50/50 em volume. Estudos da constante dielétrica estão sendo realizados para melhorar o acoplamento polímero/cerâmica.

(FUNDAÇÃO BANCO DO BRASIL - F.B.B., FUNDUNESP, FAPESP)

## GASSELECTIVE MEMBRANES DEPOSITED BY PLASMA POLYMERIZATION PROCESS

*Sonaly Horta de Oliveira Cruz\*, Rogério Pinto Mota\*, Stefan Nehlsen\*\* and Jörg Müller.*

\*Departamento de Física e Química - FEG /UNESP, \*\* Technische Universität Hamburg-Harburg/ Germany

*Key words:* plasma, membrane, permeability

Polymerization may occur in glow discharge containing organic or mixtures of organic and inorganic gases and/or vapours. This process is important for the preparation of new materials, particularly thin films presenting remarkable characteristics such as high uniformity, good adhesion to different substrates and pinhole free. In this work, we study films deposited by use of  $C_2H_4$  (ethylene) and HMDSO (hexamethyldisiloxane) to produce gasselective membranes in radio-frequency glow discharges. The deposition system was a capacitively coupled parallel plate bell-jar type reactor, excited in 13,56 MHz and the reactor was evacuated by a mechanical and a diffusion pump until  $10^{-5}$  Torr. The process pressure was about 30 mTorr and the rf power input was in the range 10 to 50W. The substrates used for the plasma polymerization of the thin films were asymmetric  $Al_2O_3$  porous membranes and silicon wafers for infrared analysis. Our results indicated that the permeability related to nitrogen was stable at low pressure. However at higher power of the polymerization process, around 50W, the permeability of nitrogen showed a drastic increase with the variation of monomer composition. At fixed small rf power input, we could observe that the membranes permeability was controlled by solution-diffusion mechanism. The refractive index of these thin films were between 1,55 and 1,75, and the deposition rate increases when the rf power input increases from 10 to 50W, presenting values from  $10\text{Å}/\text{min}$  to  $50\text{Å}/\text{min}$ , respectively. When we have an increase in the rf power, the fragmentation of the molecules in the plasma increases too, so increasing the deposition rates and also the density of these films.

## PROCESSO DE FABRICAÇÃO DE UM MOSFET DE POLI(O-METOXIANILINA)

*Roberto Koji Onmori*

*Laboratório de Microeletrônica/PEE-USP/São Paulo-SP*

*Luiz Henrique C. Mattoso*

*CNPDIA/EMBRAPA/São Carlos-SP*

*Roberto Mendonça Faria*

*DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP*

*Palavras-chave:* poli(o-metoxianilina), transistor.

A poli(o-metoxianilina) (POMA) é um material polimérico condutivo que além de apresentar boa estabilidade em suas propriedades elétricas é de fácil processamento. Esse trabalho descreve processos realizados para a fabricação de um transistor de efeito de campo em um filme fino de POMA, tendo como substrato uma lâmina de silício tipo p. A resistência do silício é em torno de  $1,0\ \Omega\cdot\text{cm}$ , e sobre ele é depositado uma camada de óxido de silício ( $\sim 30\ \text{nm}$ ). Sobre essa estrutura deposita-se um filme fino de POMA ( $\sim 500\ \text{nm}$ ) pelo processo de "spin coating", ou ainda em forma de filme ultra-fino pela técnica de Langmuir-Blodgett ( $\sim 10\ \text{nm}$ ). Dopa-se então o material com uma solução de trifluor acético (TFA) 1,0M (ou HCl 1,0M) e com isso, sob polarização há a formação do canal do transistor. Para a confecção dos contatos (dreno e fonte) usou-se o processo de litografia por feixe de elétrons. Esta técnica consiste na deposição de uma fina película de polimetacrilato de metila (PMMA) cuja sensibilização é feita através de um feixe de elétrons de um microscópio eletrônico de varredura. O feixe é comandado por um microcomputador (PC) de forma a transferir o desenho dos contatos. A geometria do dreno e da fonte tem a forma de um pente onde os dentes estão intercalados e distanciados de  $10\ \mu\text{m}$ . Remove-se a região sensibilizada, evapora-se ouro sobre a amostra e remove-se o resto da PMMA com acetona. A caracterização desse tipo de dispositivo está em curso, e pode-se variar como parâmetros, o grau de dopagem do polímero, sua espessura, e a geometria dos contatos.

## **DISPOSITIVO VERSÁTIL PARA MEDIDAS DE CONDUTIVIDADE BASEADO NO USO DE UMA CABEÇA DE IMPRESSORA**

*George Carlos do Nascimento*

Instituto Tecnológico do Estado de Pernambuco - ITEP  
Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco

*Celso P. de Melo*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-Chave:* condutividade, método das quatro pontas, polímeros condutores

O interesse no entendimento dos processos microscópicos de transferência de carga em polímeros condutores tem levado a um grande esforço no sentido de desenvolvimento de métodos simples e confiáveis para a determinação da condutividade em amostras desses materiais. A necessidade do uso de dispositivos com projeto padrão de fácil construção e que levem a uma boa reprodutibilidade de resultados se tornou mais urgente com a possibilidade de uso de polímeros condutores (como, por exemplo, o polipirrol) dopados por diferentes substâncias como sensores para identificação de espécies químicas em um ambiente. O padrão de alteração da condutividade quando uma matriz formada por diferentes amostras de um desses polímeros é exposta a reagentes específicos pode ser utilizado para associar uma "assinatura" específica para cada composto. Quando quatro pontas alinhadas e a um espaçamento determinado toca o filme, os dois eletrodos externos podem ser usados para a referência de corrente enquanto os internos permitem a determinação da tensão, e assim da resistividade da amostra. Neste trabalho, mostramos como um dispositivo do tipo quatro pontas para medidas da condutividade d.c. de filmes de polímeros condutores pode ser facilmente construído a partir do uso dos pinos da cabeça de uma impressora matricial. Em nossos dispositivos a resistência de contato para os eletrodos, feitos de aço inox, com diâmetro da ordem de 0,33 mm e separados por uma distância bastante regular (0,66 mm), ficou menor que 0,2 Ohms. O fato de que cada um desses eletrodos pode ser acionado eletricamente, com fino controle sobre a pressão exercida na amostra, é um argumento a mais em favor da versatilidade do dispositivo. O eventual recobrimento dos eletrodos, feitos de aço inox, por um metal como o ouro deve contribuir para uma diminuição da resistência de contato com as amostras a serem analisadas.

(Apoio CNPq, FINEP, FACEPE).

## **Implementação Concorrente de um Sistema Automatizado de Medidas Termo-Elétricas em Tempo Real sob Plataforma GUI**

*Odemir Martinez Bruno, Roberto Mendonça Faria e Luciano da F. Costa*

IFSC - USP- São Carlos

*Palavras-Chave:* tsc, multitarefa, gui

Nesse trabalho apresentamos a implementação de uma arquitetura concorrente para o Sistema Automatizado de Medidas Termo-Elétricas em Plataforma GUI. O Sistema Automatizado de Medidas Termo-Elétricas foi desenvolvido de modo a realizar o controle da temperatura de uma estufa, de forma que seja possível gerar rampas lineares com taxas programáveis, e também a leitura de sinais analógicos referentes ao sistema, como corrente e temperatura, e processar os sinais obtendo como resultado curvas gráficas (sinais processados em função do tempo). Esse método de controle e aquisição de dados, é particularmente aplicado a medidas de correntes termoestimuladas (TSC), mas que podem ser estendidas a sistemas semelhantes. Com a implementação concorrente do Sistema automatizado de medidas TSC em plataforma GUI, temos a possibilidade de realizarmos inúmeras medidas ao mesmo tempo, utilizando um único microcomputador acoplado a diversos módulos TSC. Tais módulos consistem basicamente de uma estufa (que possui suporte mecânico, à amostra e seus eletrodos), de circuitos de amplificação e leitura dos sinais provenientes da amostra, de um sistema de controle e de uma interface entre o módulo e o microcomputador. Através de programação concorrente em ambiente multitarefa, o sistema efetua o controle de temperatura e a aquisição de dados provenientes dos diversos módulos TSC, em tempo real, de forma assíncrona (as medidas podem ser iniciadas em diferentes instantes) e independente, permitindo que diversas medidas sejam realizadas simultaneamente. O sistema faz uso de microcomputador padrão IBM PC AT, com microprocessador 486 ou superior, e utiliza o MS Windows 95 como ambiente multitarefa e plataforma GUI ("Graphic User Interface").

## ESTUDO POR RESSONÂNCIA MAGNÉTICA DE UM COMPÓSITO FORMADO POR UM COMPLEXO POLIMÉRICO E CARBON BLACK

R. W. A. Franco<sup>1</sup>, T. Auler<sup>1</sup>, C. Magon<sup>1</sup>, J. P. Donoso<sup>1</sup>, J.M. Pernaut<sup>2</sup>, L.N. Oliveira<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física - USP - São Carlos

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Exatas - UFMG - Belo Horizonte

*Palavras Chave:* RMN; RPE; Compósito

Os compósitos formados pelo complexo polimérico  $P(EO)_8LiCl_4$  e *carbon black* (CB), onde P(EO) é o Poly(óxido de etileno), foram estudados utilizando técnicas de Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE) e Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Os complexos entre P(EO) e sais alcalinos são condutores iônicos poliméricos [1]. Quando se dispersam partículas de carbono no  $P(EO)_8LiCl_4$  se obtém um compósito, o qual foi recentemente proposto para a fabricação de capacitores eletroquímicos [2]. O estudo de RPE foi realizado em banda X, a temperatura ambiente, em amostras com 5, 10, 15 e 20% de CB. Nas amostras de concentrações mais baixas (5 - 10%) observou-se um espectro quase simétrico ( $A/B \approx 1 - 1.5$ ) enquanto na amostra com 20% de CB observou-se uma linha tipicamente metálica, com  $A/B \approx 2.5 - 3.0$ . Acredita-se que o limiar de percolação nestes sistemas esteja em torno de 15% de CB. Nas mesmas amostras foi realizado um estudo de RMN a 37.8 MHz da forma da linha do <sup>1</sup>H no intervalo de temperatura entre 170 e 350 K. Observou-se que a largura da linha de ressonância se reduzia fortemente a uma dada temperatura, como esperado para um sistema com movimento termicamente ativado (*motional narrowing*). A temperatura na qual ocorre este processo aumenta com a concentração de CB, o que reflete um aumento na mobilidade da cadeia polimérica e, por conseguinte, na mobilidade iônica. Este resultado é consistente com aquele encontrado para o <sup>7</sup>Li no compósito  $P(EO)_8LiClO_4+LiAlO_2$  [3].

[1] J. Chem Phys. 98 (1993) 10026; [2] J. Power Sources 55 (1995) 93; [3] Solid State Ionics 53/56 (1992) 1102.

## ESTUDO DE HÍBRIDOS CONDUTORES IÔNICOS (ORMOLITAS) POR ESPECTROSCOPIA DE ALTA RESOLUÇÃO DE RMN DE ESTADO SÓLIDO

N.C.Mello, T.J.Bonagamba, H. Panepucci, K. Dahmouche, M. Atik, M. Aegerter<sup>1</sup> e P. Judeinstein<sup>2</sup>

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - São Carlos - SP

<sup>1</sup>Institut für Neue Materialien (INM), Im Stadtwald, Gebaude 43, D 66123, Saarbrücken - Germany

<sup>2</sup>Laboratoire de Chimie Structurale Organique, URA CNRS 1384, Université Paris-sud, 91405 Orsay- France

*Palavras-Chaves:* RMN Relaxação Híbridos

Duas famílias de nanocompositos híbridos orgânicos(polímero-Li)-inorgânicos(silica) condutores iônicos (ormolitas), foram estudadas por RMN de <sup>7</sup>Li. Os compostos da família I apresentam ligações químicas covalentes entre as fases orgânicas e inorgânicas, enquanto que os da família II não. Ambas foram estudadas em função da concentração de lítio, comprimento da cadeia polimérica e da razão em peso polímero/silica. As propriedades estruturais e dinâmicas do lítio e da cadeia polimérica foram analisadas através de medidas de RMN de <sup>7</sup>Li entre -100 °C a 90 °C em 2T. As larguras de linha do <sup>7</sup>Li foram obtidas com e sem desacoplamento de <sup>1</sup>H. O tempo de relaxação spin-rede  $T_1$  do <sup>7</sup>Li foi medido usando inversão-recuperação. Quando necessário, o desacoplamento de <sup>1</sup>H foi usado durante as aquisições dos FIDs para aumentar a relação sinal/ruído, permitindo medir  $T_1$  numa faixa mais extensa de temperatura e concentração de lítio. A dependência da largura de linha com a temperatura para as várias composições mostrou que: a) as temperaturas de transição das larguras de linha correspondem a transição vítrea do polímero medidas por outras técnicas; b) para todas as amostras, aumentado a concentração de lítio ou diminuindo a razão em peso polímero/silica, aumentamos a rigidez da cadeia polimérica; c) para as amostras da família I, a mobilidade aumenta com o comprimento da cadeia, enquanto que com as da família II acontece o oposto; c). A análise do comportamento do mínimo de  $T_1$  das mesmas amostras estão de acordo com os resultados acima e são consistentes com os valores de condutividade observados. Para algumas amostras, um segundo estreitamento de linha é observado em torno de 60 °C, e possivelmente está relacionado com o movimento dos íons  $Li^+$  não ligados ao polímero, já que não observamos nenhuma alteração estrutural no polímero através de DSC e a condutividade apresentou um aumento em torno desta temperatura.

## ESTUDOS ESTRUTURAIS E LIMAR DE FRATURA EM SILOXANOS POLIMERIZADOS A PLASMA

*Cibele Maria Zerbini Ramalho, Brigitte Klaffke Dupouy, Cristian Cley Paterniani Rita, Robinson Carlos Teixeira,  
Rogério Pinto Mota, Roberto Yzumi Honda, Mauricio Antonio Algatti e Herman Jacobus Cornelis Voorwald*

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista,  
Campus de Guaratinguetá, Guaratinguetá, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* fratura, siloxanos, polímeros

Dentro da classe de novos materiais encontram-se em crescente interesse acadêmico e tecnológico, os polímeros orgânicos e seus derivados obtidos em descargas elétricas de baixa em gases e/ou vapores orgânicos, excitados por corrente contínua ou frequência variável. Neste trabalho discutiremos a estrutura molecular, a adesão, a morfologia de superfície associada ao dobramento de filmes finos de hexametildisiloxano (HMDSO) depositados sobre substratos de vidro, cobre e alumínio, este último utilizado em aeronáutica. Os filmes foram sintetizados num reator cilíndrico mantido a pressão de vapor de HMDSO entre 0,4 e 1,0 mbar, cuja a descarga foi excitada por valores de tensão contínua variando entre 300 a 1000V negativos acoplado a dois eletrodos planos e circulares medindo 8cm de diâmetro e espaçados até 4cm. Nos parâmetros acima, os filmes apresentaram espessuras entre 2000 a 30000 Å, correspondendo a taxas de deposição na faixa de 2 a 12 Å/seg, medidas por perfilometria e microscopia interferométrica. A estrutura molecular foi evidenciada por espectrofotometria infravermelha na região entre 5000 e 400  $\text{cm}^{-1}$ , revelando absorções fortes entre 2960 e 2900  $\text{cm}^{-1}$ , características de estiramentos simétricos e assimétricos em grupos  $\text{CH}_2$  e  $\text{CH}_3$ . Em 1260  $\text{cm}^{-1}$  o estiramento da ligação  $\text{Si-CH}_3$ , forte absorção devido a  $\text{Si-O-Si}$  e  $\text{Si-O-C}$  entre 1200 e 1000  $\text{cm}^{-1}$  e deformação assimétrica C-H em  $\text{Si-CH}_2$  em 840  $\text{cm}^{-1}$  e deformação simétrica CH em  $\text{Si-CH}_2$  em 796  $\text{cm}^{-1}$ . Os filmes se mostraram bastante aderentes aos substratos de vidro e metálicos, resistindo ao teste "Scott Tape", não se desgrudando dos substratos quando sobre eles foi aplicada carga acima de 10 Newtons, tanto para os filmes depositados sobre substratos rugosos quando polidos. Os pares filme/substratos foram submetidos a condições de dobramento gerando ângulos entre 0 e 180° que após análise por banco metalográfico apresentavam variações nos tamanhos de grão ao longo da região da dobra em condições diferenciadas para os vários parâmetros em que os filmes foram depositados.

## MEDIDAS DE CAPACITÂNCIA EM HEXAMETILDISILAZANO E BENZENO POLIMERIZADOS A PLASMA

*Madalena Alice Priante, Deborah Cristina Ribeiro dos Santos,  
José Roberto Ribeiro Bortoleto, Rogério Pinto Mota e Mauricio Antonio Algatti*

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista,  
Campus de Guaratinguetá, 12500-000 Guaratinguetá, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* capacitância, polímeros, plasma

Polímeros obtidos a partir de descargas excitadas por corrente contínua e rádio frequência em atmosferas contendo vapores orgânicos, siloxanos e compostos organo-metálicos a baixa pressão no interior de reatores de eletrodos de placa paralelas tem sido utilizados em uma ampla gama de aplicações compreendendo a indústria de microeletrônica, a confecção de membranas permoseletivas utilizadas na separação de gases, bem como no revestimento de superfícies sujeitas a presença de atmosferas corrosivas. Os polímeros processados a plasma apresentam propriedades notáveis sendo inertes a maioria dos solventes orgânicos, bem como aos ácidos moderados apresentando uma estrutura livre de "pinholes". Tais propriedades decorrem principalmente do fato da cadeia polimérica ser altamente entrelaçada. Estes polímeros podem ser utilizados ainda na confecção de microcapacitores de grande estabilidade. Neste trabalho efetuamos medidas da capacitância de capacitores de placas paralelas obtidos a partir de descargas excitadas por DC e RF em atmosferas de Hexametildisilazano (HMDSN) e Benzeno em pressões variando de 20 a 100 mTorr. As capacitâncias foram medidas utilizando-se um circuito na configuração de ponte de Schering alimentada por um oscilador operando na faixa de frequência de 100 Hz a 100 KHz. Os resultados obtidos indicam que a capacitância permanece constante nesta faixa de frequência sendo a constante dielétrica da ordem de 2,3. Os capacitores confeccionados apresentaram espessuras variando entre 0,5  $\mu\text{m}$  a 2,0  $\mu\text{m}$  e capacitâncias variando entre 25 a 100 pF.

(UNESP-PROPP, FUNDUNESP)

## RESSONÂNCIA MAGNÉTICA EM POLY(O-METHOXYANILINE)

R. R. Souza, C. J. Magon, L. T. S. Auler, J. P. Donoso

Instituto de Física - USP - São Carlos

*Palavras Chave:* RMN, RPE, Polianilina

Neste trabalho utilizamos técnicas da Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Eletrônica (RPE) para investigar a estrutura e dinâmica de spins nos compostos quimicamente sintetizados Poly(O-Methoxyaniline) - POMA, puros e dopados com TFA ou HCl. As medidas de RMN consistem na determinação dos tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$  dos prótons  $^1\text{H}$  e do  $^{19}\text{F}$  no caso das amostras dopadas com TFA, em função da temperatura na faixa de  $-200^\circ\text{C}$  e  $+50^\circ\text{C}$ , nas frequências de 24MHz e 36MHz. Observou-se também que a dinâmica do  $^1\text{H}$  é fortemente dependente do grau de hidratação das amostras. Os resultados mostram que moléculas de água fixas na estrutura do material ainda estão presentes mesmo após secagem em estufa a  $60^\circ\text{C}$  durante 12 hs. Experimentos utilizando hidratação com água deuterada estão em progresso. Para comparação, apresentamos também os resultados obtidos na polianilina (PANI) no estado esmeraldina. Através das medidas de RPE, banda X, efetuadas na faixa de 4K a 300K, pudemos estudar o comportamento da forma da linha e da sua intensidade em função da temperatura. Os resultados mostram uma dependência da intensidade da linha do tipo Curie em baixas temperaturas e Pauli acima de 200K. Esta temperatura de transição, associada com a delocalização dos portadores de carga, varia com o grau de dopagem da amostra. Observou-se também que em baixa temperatura, 12K, o espectro de RPE da POMA-EB apresenta uma estrutura hiperfina resolvida composta por cerca de 15 a 17 linhas que está sendo interpretada como devido à interação com spins nucleares  $^1\text{H}$  ( $I=1/2$ ) e  $^{14}\text{N}$  ( $I=1$ ), presentes na vizinhança do centro paramagnético. Serão também apresentados resultados preliminares de susceptibilidade magnética AC, em 100Hz, obtidos em baixas temperaturas, 4K a 20K.

## RMN DE ÍONS DE METAIS ALCALINOS EM COMPLEXOS DE POLI(ETILENOGLICOL) DIESTERATO (DPEG - 400)

Marcus Vinicius Giotto, Tito José Bonagamba, Horácio Panepucci  
Armando Lopes de Oliveira<sup>1</sup> e Clausymara Lara Sangiorge<sup>1</sup>

Departamento de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos, USP

<sup>1</sup>Departamento de Física, ICEX, UFMG

*Palavras-Chaves:* rmn, relaxação, polímero

O Poli(etilenoglicol) Diesterato (DPEG) de peso molecular 400, é composto por uma seção não polar que apresenta uma estrutura rígida e uma seção, mais móvel, de segmentos polares de óxido de etileno. Este último pode dissolver sais de metais alcalinos, tais como  $\text{LiClO}_4$  e  $\text{NaClO}_4$ , dando origem aos complexos de DPEG-400. Apresentamos os resultados de RMN de  $^7\text{Li}$  e  $^{23}\text{Na}$  para diferentes valores da razão  $n=[\text{O}]/[\text{metal}]$ . Os espectros foram obtidos de  $-80^\circ\text{C}$  a  $90^\circ\text{C}$  em um campo magnético de 2 Teslas para amostras com  $n$  de 5 a 50. Em baixas temperaturas todos os espectros de  $^7\text{Li}$  apresentam um padrão de pó quadrupolar. Para  $n \leq 9$ , este padrão é observado acima da temperatura de fusão do material. O acoplamento quadrupolar sofre uma abrupta redução de 1270Hz a 850Hz na temperatura de fusão de  $35^\circ\text{C}$ . Alterações na largura de linha central do  $^7\text{Li}$  podem ser observadas em torno de  $-20^\circ\text{C}$ ,  $35^\circ\text{C}$  e  $70^\circ\text{C}$ . A primeira está relacionada com a temperatura de transição vítrea ( $T_g = -20^\circ\text{C}$  para  $n=5$ ) enquanto que a segunda em torno de  $35^\circ\text{C}$  está associada ao ponto de fusão do material. A alteração em torno de  $70^\circ\text{C}$  pode estar relacionada com o movimento livre dos íons  $\text{Li}^+$  em um processo de difusão. A relaxação spin-rede  $T_1$  do  $^7\text{Li}$  em função da temperatura, depende de  $n$ . Determinamos parâmetros relacionados com o mecanismo de condução iônica, tais como energia de ativação e frequência de salto do íon. Os espectros de RMN de  $^{23}\text{Na}$  apresentam uma nítida redução na largura de linha entre  $0^\circ\text{C}$  a  $-20^\circ\text{C}$  para as amostras com  $n = [\text{O}]/[\text{Na}]$  de 5 a 50. Esta redução é seguida por um máximo relativo na largura de linha ocorrendo entre  $40^\circ\text{C}$  e  $50^\circ\text{C}$  que está associada com o mínimo de  $T_1$ , mostrando que acima destas temperaturas o complexo se comporta como um líquido.

Agradecimentos: FAPESP, CNPq, FINEP, CAPES

## PERFORMANCE DE UM EQUIPAMENTO PARA ENSAIO DE TRAÇÃO DE POLÍMEROS

A. V. B. da Silva, I. Pepe, M. C. A. Esperidião\* e R. G. de Cerqueira\*

Instituto de Física - UFBA

\* Instituto de Química-UFBA

*Palavras chave* : polímeros, ensaio de tração, polipropileno

Nosso trabalho consistiu em substituir os meios de medidas, tanto de força como do deslocamento do aparelho de tração da CONTEN. Essas medidas, originalmente mecânicas foram substituídas por medidas elétricas. O deslocamento passou a ser determinado por um disco ótico codificado, enquanto a medida de força é feita por uma célula de carga resistiva MM-50 da KRATOS. O aparelho foi testado em duas finalidades: i) para a descrição do comportamento mecânico de filmes finos de polipropileno (PP), orientados uniaxialmente (30  $\mu\text{m}$  de espessura), ii) para a demonstração da influência da orientação do filme sobre as curvas de força (F) x deslocamento ( $\Delta l$ ). No primeiro caso, obteve-se a curva  $F = f(\Delta l)$  e calculou-se a curva de tensão real x extensão real ( $\epsilon = \ln A_0/A$ ) com base na análise da variação da área da secção transversal do corpo de prova ( $l_0=40 \times 6,4 \text{ mm}$ , 115mm) na zona de formação do estrangulamento. Os ensaios foram realizados a 28 °C a uma velocidade de 0,38 mm/seg. A variação da área ao longo de cada ensaio foi determinada medindo-se a espessura e a largura do corpo de prova em intervalos de tempo previamente estabelecidos. Os valores de força medidos variaram entre 100 a 350  $\pm$  11 gf. Pôde-se observar que, no início do teste, a área diminui rapidamente e a velocidade de extensão ( $\Delta\epsilon/\Delta t$ ) é a mais alta devido à formação do estrangulamento. Este propaga-se ao longo do corpo de prova mas, a respectiva área é praticamente constante. No caso dos filmes orientados, pôde-se demonstrar que a tensão no limite de escoamento é duas vezes maior para os filmes alinhados paralelamente à direção da força do que para aqueles alinhados transversalmente. A reprodutibilidade em cinco determinações foi de 30 gf.

## THE THEORY OF DILUTE POLYELECTROLYTE SOLUTIONS

*Yan Levin*

Instituto de Física da UFRGS - RS

*Palavras-chave:* polyelectrolytes, polymers

Many complex organic molecules such as DNA and other polyphosphates, upon delusion in aqueous solutions, become ionized. The importance of polyelectrolyte nature of these polymers has been realized for a long time, and is expected to strongly affect how these molecules interact with their environment. The difficulty in studying polyelectrolyte solutions lies in the fact that a polyion molecule usually contains on an order of a thousand charged groups. The macromolecular nature of the polyion requires, in addition to the already difficult problem of long range Coulomb interactions, to take a full account of the intramolecular structure of the polymer. Fortunately some of the most interesting polyions in nature, such as DNA and other polyphosphates and polysaccharides, are sufficiently rigid so that on short enough length scales they can be treated as "rodlike". We present a new theory of a rodlike polyelectrolyte solution. We find that at low densities, and below temperature  $T_{cl}$ , the counterions condense onto the polyions forming clusters consisting of one polyion and  $n$  counterions. The distribution of cluster sizes is gaussian. Above  $T_{cl}$  the solution consists of free (unassociated) counterions and polyions. The limiting, low density, laws for the osmotic pressure inside the polyelectrolyte solution are found. Finally, unlike some recent suggestions, we demonstrate that the counterion condensation is quite distinct from the Kosterlitz-Thouless transition. The cluster formation inside the polyelectrolyte solution is similar to the formation of micelles in amphiphilic systems. There is, however, an important difference. While the amphiphilic micelles can be diluted away (broken apart) by increasing the amount of solvent, the strong electrostatic interactions keep the polyion-counterions clusters from dissociating even as the concentration of polyelectrolyte is decreased all the way down to zero.

## ESTUDO DE FLUTUAÇÕES TÉRMICAS EM MEMBRANAS UTILIZANDO TEORIA DE CAMPOS

*Maria Elisa Sarraf Borelli e Carlos Eugenio Imbassahy Carneiro*

Depto. de Física Geral - Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* flutuações, membranas, teoria de campos

O estudo de membranas fluidas bidimensionais é, atualmente, de grande interesse em Mecânica Estatística, além de apresentar aplicações significativas em Biologia e na teoria de microemulsões e outros fluidos complexos. Para descrever as propriedades dessas membranas e caracterizar as transições entre diferentes morfologias, é necessário entender primeiramente o papel das flutuações térmicas, responsáveis pela existência de ondulações em grandes escalas, um fenômeno observado pela primeira vez nas paredes das células vermelhas do sangue, no século XIX.

O modelo mais utilizado para o estudo do comportamento de flutuações de membranas foi proposto por Helfrich em 1973 (*Z. Naturforsch.* 28c, 693 (1973)). Este modelo descreve a mecânica estatística das membranas em equilíbrio em termos de apenas dois parâmetros: o potencial químico  $\mu_0$  para adição de moléculas e a rigidez  $\kappa_0$ . Este modelo foi estudado através de teoria de campos. A teoria de perturbação até ordem 1-loop foi usada para se obter os coeficientes renormalizados  $\mu_{eff}$  e  $\kappa_{eff}$ . Os primeiros cálculos foram realizados por Helfrich (*J. Phys. (Paris)* 46, 1263 (1985)), Peliti e Leibler (*Phys. Rev. Lett.* 54, 1690 (1985)) e Förster (*Phys. Lett.* 114A, 115 (1986)), e apresentaram resultados diferentes. Em 1994, Cai et. al (*J. Phys. II France* 4, 931 (1994)) propuseram uma nova medida de integração, que induz correções na hamiltoniana do modelo, para explicar estas discrepâncias até ordem 1-loop.

Neste trabalho realizamos cálculos até ordem 2-loops para o modelo de Helfrich com o objetivo de determinar  $\mu_{eff}$  e  $\kappa_{eff}$  até esta ordem. Para tanto, introduzimos correções à medida de integração de forma análoga ao proposto por Cai et al.

(FAPESP)

## COMPORTAMENTO DA CONECTIVIDADE CRÍTICA DE SAWS NA FAMÍLIA DE TRIÂNGULOS DE SIERPINSKI

Fabio A.C.C. Chalub<sup>a</sup>, Fábio D.A. Aarão Reis<sup>b</sup> e Rosane Riera<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

<sup>b</sup>Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ

**Palavras-Chave:** self-avoiding-walk, fractal, conectividade

Os caminhos aleatórios sem auto-interseção (SAWs) têm sido usados para o estudo do crescimento de polímeros, em especial sobre estruturas fractais. Neste trabalho calculamos a conectividade crítica  $\mu$  para vários membros da família de Triângulos de Sierpinski, e estudamos o seu comportamento assintótico no limite euclídeano. Cada membro de tal família é caracterizado por um parâmetro de geração  $b$ , onde  $2 \leq b < \infty$ . A dimensão fractal é dada por  $D_F = \ln[b(b+1)/2]/\ln b$ . Quando  $b \rightarrow \infty$ ,  $D_F \rightarrow 2$ . Monta-se uma equação recursiva relacionando o número de inserções de SAWS em uma escala de construção do fractal com a escala anterior, até uma escala mínima, onde a contagem é feita explicitamente. Tomando-se o limite da razão entre o número de inserções e o número de sítios obtemos a densidade de SAWS por sítio da rede fractal,  $c_n(b)$ . Demonstra-se rigorosamente que esta densidade converge para a densidade de SAWS por sítio da rede triangular (euclídeana), no limite  $b \rightarrow \infty$ . Dada a função geratriz  $C_b(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(b)x^n$ , a conectividade crítica é dada por  $\mu_b = x_c^{-1}$ , onde  $x_c$  é o raio de convergência da função. Através do método de expansão em série e da expressão  $\mu_b = \lim_{n \rightarrow \infty} (c_n(b))^{(1/n)}$  obtemos valores para  $\mu_b$ ,  $b$  variando de 2 a 100, que, com exceção do caso  $b = 2$ , conhecido exatamente, são inéditos na literatura. A análise do comportamento da seqüência de funções  $(c_n(b))^{(1/n)}$  sugere a possibilidade de inversão dos limites em  $n$  e  $b$ , o que implica na convergência de  $\mu_b$  para a conectividade crítica da rede triangular  $\mu_T$  no limite euclídeano. Os valores numéricos de  $\mu_b$  reforçam a conclusão que  $\lim_{b \rightarrow \infty} \mu_b = \mu_T$ , além de fornecer uma expressão assintótica para  $\mu_b$ .

(CNPq)

## ADSORÇÃO POLIMÉRICA EM SUPERFÍCIES ESFÉRICAS

M. Argollo de Menezes<sup>+</sup>, A. de Oliveira Sousa<sup>++</sup>, A.F. Siqueira<sup>++</sup>

<sup>+</sup> Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ,

<sup>++</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará - CE

**Palavras-chave:** adsorção, propagadores de Feynman, IGSAW

O problema de adsorção polimérica por uma superfície plana é conhecido, bem como suas soluções numérica e analítica. Com isso, ficam determinados expoentes críticos e parâmetros importantes, como a densidade de monômeros em um ponto  $r$  e o número de polímeros adsorvidos por unidade de área (P.-G. de Gennes, *Rep. Prog. Phys.*, 1969, 32, 187-205). Pretendemos analisar o problema para uma geometria esférica, que tem importantes aplicações tecnológicas.

Estatisticamente, o problema de conformação de macromoléculas longas é análogo ao problema da determinação da trajetória de uma partícula, onde a configuração média de uma cadeia de monômeros,  $G_n(r, r')$ , corresponde à uma trajetória clássica de partícula onde  $G_n(r, r')$  é o propagador da formulação de Feynman da mecânica quântica (P.-G. de Gennes, "scaling concepts in polymer physics", Cornell Univ. Press, London, 1985). Podemos analiticamente tratar o problema através das inúmeras técnicas desenvolvidas pela mecânica quântica, como a expansão diagramática usando os propagadores de Feynman (R.D. Mattuck, "A guide to Feynman diagrams in the many-body problem", Dove Publications, New York, 1992). Outra forma é usar uma expansão espectral para  $G_n(r, r')$  e resolver a equação diferencial parcial análoga à equação de Schrödinger, onde o número de ligações monômero-monômero equivale a um tempo imaginário. Usamos a aprox. do estado fundamental na solução da equação característica do problema. O problema computacional pode ser resolvido usando técnicas de Monte-Carlo para calcularmos a configuração média de um self-avoiding walk (SAW) e obter expoentes característicos do problema. Uma rotina booleana é implementada ao programa de modo a evitar que as caminhadas terminem prematuramente pelo fato do polímero interceptar-se. O uso de tal rotina caracteriza o polímero pelo chamado indefinitely growing self-avoiding walk (IGSAW). Com isso obtemos a entropia média por número de monômeros e a dimensão fractal do polímero em questão.

## Interface Entre Polímeros

S. R. Gomes Júnior e L. S. Lucena

Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas - UFRN  
Campus Universitário, 59072-970 - Natal - RN

*palavras chave:* polímeros, interface, crescimento cinético, universalidade.

Muito recentemente, o interesse no estudo de interfaces entre materiais poliméricos vem crescendo, sendo inclusive, tema de um boletim especial da sociedade americana de materiais. Utilizando o modelo de crescimento cinético generalizado (GKGM) estudamos as propriedades da interface formada entre polímeros da espécie 1 e polímeros da espécie 2. As simulações são realizadas da seguinte forma: numa rede quadrada de tamanho  $L$  são escolhidas duas linhas paralelas de sítios, separadas de  $L/2$ . Em uma das linhas os sítios são ocupados, com probabilidade  $a_1$ , por sementes poliméricas da espécie 1, e na outra linha os sítios são ocupados, com probabilidade  $a_2$ , por sementes poliméricas da espécie 2. Obedecendo o algoritmo do modelo, os polímeros crescem, podendo se ramificar com probabilidade  $b$  (até não haver nenhuma direção possível de crescimento). Adicionamos ao modelo um ruído congelado, representado por impurezas que ocupam qualquer sítio da rede com probabilidade  $c$ . As médias são realizadas sobre um ensemble de 1000 amostras para cada valor da quadra  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b$  e  $c$ . Usamos redes com tamanhos variando de  $L=100$  até  $L=500$ . A medição da dimensão fractal da interface foi realizada através do método das caixas, revelando uma significativa variação no expoente  $d_f$  com os parâmetros  $a_1$  e  $a_2$ , sugerindo diferentes universalidades para a interface, além da sutil dependência de  $d_f$  com  $b$ . Medimos também a coesão dos polímeros na interface, que deve depender do número de "elos" formados entre pontas de polímeros de diferentes espécies. Aparentemente, a coesão da liga polimérica está fortemente relacionada ao seu grau de pureza, pois a variação do parâmetro  $c$  altera expressivamente o valor médio dessa grandeza, apesar da mesma também depender dos demais parâmetros. Todos os resultados foram obtidos para polímeros infinitos, ou seja, aqueles que não morrem devido ao encurralamento por impurezas, tanto na fase lisa, como na fase rugosa do GKGM.

## THE COLLAPSE AND FOLDING TRANSITIONS IN LATTICE COPOLYMERS - A MONTE CARLO STUDY

Rafael I.N. Szeinfeld<sup>1</sup>, Jorge L. deLyra<sup>2</sup> and Vera B. Henriques<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Depto. Física Geral and <sup>2</sup>Depto. Física Matemática. Instituto de Física, USP.

*key-words:* copolymers, phase transitions, monte carlo

Three questions compose the so called "Protein Folding Problem": How do proteins fold so "fast" to the Native State? (known as the Levinthal paradox); What is the thermodynamic nature of the Native State? and What is the effect of the specific amino-acid sequence on the folding process?

A possible solution to the Levinthal paradox would be the occurrence of two transitions, namely, a collapse transition (from the unfolded state to a compact globule state) and a folding transition (from the compact globule to the native state) involving respectively, two characteristic relaxation times much smaller than a random search time.

Some analytical work on simplified lattice models [e.g. *Physical Review E* 48(1):465-475] indicate that both transitions may occur in random copolymers but it is unclear whether an average over random copolymers can represent real proteins. Alternatively one may study specific copolymeric sequences (possessing characteristics believed to represent real proteins) using the Monte Carlo method. Previous work [e.g. *J. Chem. Phys.* 101(2):1444-1451 and 1519-1528] on some chosen sequences present indication that the three phases indicated above might be present, but careful analysis of the existence of the two phase transitions is still lacking.

We use the HP model [*Biopolymers* 22: 4559-4573] defined on a two dimensional square lattice to investigate the existence of the collapse transition as monitored by a series of thermodynamic quantities, namely, the mean square radius of gyration, specific heat, internal energy and the average number of internal contacts for different sizes of the chain with a fixed relative concentration of Hydrophobic residues.

Preliminary results show that the specific heat peak presents a sharpening effect as well as a shift toward greater temperatures when the chain length is increased. This indicates that at least one phase transition is occurring although it is not yet clear whether it is the collapse transition, the folding transition or both overlapped.

(CNPq)

## MODELO PROBABILÍSTICO DA DIFUSÃO DA REAÇÃO $A + B \rightarrow C$

Edina Maria de Sousa Luz<sup>1</sup> e Antonio Fernandes Siqueira  
Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará  
Caixa Postal 6030 - Campus do Pici.  
CEP 60451-970 Fortaleza Ceará Brasil.

*Palavras-chave:* mecânica estatística; difusão; cadeias de Markov

Usamos um modelo de difusão de Ehrenfest para analisar o comportamento de uma amostra constituída de duas espécies A e B que reagem dando como produto uma terceira espécie C. O sistema é mantido em um recipiente dividido em duas partições as quais denominaremos 1 e 2. No instante inicial, um número  $N_A$  de elementos da espécie A é distribuído aleatoriamente entre as partições 1 e 2, o mesmo ocorrendo com os  $N_B$  elementos da espécie B. O processo de difusão é analisado através de simulação Monte Carlo onde cada passo da modelagem se dá em tres etapas. Primeiro, uma das partições é escolhida aleatoriamente com iguais probabilidades. Depois, uma das espécies é escolhida ao acaso e transportada para a outra partição. Finalmente a especie escolhida é colocada em uma posição aleatória da partição. Se existir uma especie diferente neste ponto ocorre a reação. Um estado do sistema é definido pelo número de  $N_A$  da especie A na partição 1, e obviamente a probabilidade para uma escolha de A dependerá deste número  $N_A$ . É feito uma análise da lei de escala  $N_C \sim t^\gamma$ , onde t representa o número de passos Monte Carlo da simulação. Os resultados são comparados com aqueles obtidos por meio de equações de difusão para duas especies, e apresentam boa concordância qualitativa.

<sup>1</sup>Endereço permanente: Departamento de Matemática da Universidade Estadual do Piauí.  
Campus do Pirajá. CEP 64000-000 Teresina Piauí

UFC, CNPq e FINEP.

## FORÇA ENTRÓPICA E FOLDING DE MACROMOLÉCULAS.

L. F. O. Rocha  
Departamento de Física e Matemática, FFCLRP-USP, Ribeirão Preto, SP  
M. A. A. da Silva e A. Caliri  
FCFRP-USP - Departamento de Física e Química, FCFRP-USP, Ribeirão Preto, SP

*Palavras-chaves:* macromolécula, folding, Monte Carlo.

Forças efetivas entre monômeros de um polímero é uma simplificação muito empregada para representar o efeito hidrofóbico no mecanismo do *folding*. Alternativamente, neste trabalho, consideramos a interação hidrofóbica como uma força entrópica, resultante da interação direta *cadeia-fluido*. O modelo de cadeia considerado é constituído por esferas rígidas de diâmetro  $D$ , conectadas por segmentos filamentosos (como num colar); a mesma é inserida num meio fluido, também constituído de esferas rígidas de diâmetro  $D$ . Todas as interações são do tipo *hard core*. Adicionalmente, consideramos as esferas recobertas por ganchos minúsculos, de tal forma que as partículas do fluido, próximas da cadeia polimérica, tenham seus graus de liberdade reduzidos. Assim, qualquer processo espontâneo tenderá levar a molécula a uma conformação compacta, a fim de satisfazer a 2ª lei da termodinâmica. Empregamos simulação Monte Carlo para estudar o sistema descrito. A transição entre duas configurações  $C_1 \rightarrow C_2$  é permitida se a superfície de  $C_2$  é menor que a de  $C_1$ . Do contrário,  $C_2$  só será aceita se  $R < e^{-\alpha \Delta S}$ , onde  $R$  é um número randômico entre zero e 1. O fator  $\alpha$  (função da temperatura) representa o grau de hidrofobia cadeia-fluido. A variação da entropia  $\Delta S$ , é proporcional à área superficial da molécula. Nossos resultados mostram uma clara mudança de regime da fase *coil* para a fase globular, para  $\alpha = 0.3$ , aproximadamente. Contudo, o resultado mais significativo, com respeito ao *folding* é que: (i)- As interações do tipo hidrofóbica, como aqui representadas, rapidamente levam a molécula para um forma compacta, porém (ii)- mantendo-a extremamente maleável. Este resultado é importante porque o espaço de fase é enormemente reduzido sem contudo fixar a macromolécula, ou parte dela, numa específica configuração. De fato este resultado pode contribuir para uma nova perspectiva no estabelecimento do *folding pathway*.

(CNPq, CAPES, FAPESP)

## TRANSPORTE DE POLÍMEROS EM MEIOS DESORDENADOS

*Hênio Henrique Aragão Rêgo*

*Liacir dos Santos Lucena*

Departamento de Física Teórica e Experimental - Universidade Federal do Rio Grande do Norte

*Palavras-Chave:* reptação, difusão, polímeros

Utilizamos um modelo generalizado de reptação e simulações computacionais para investigar a difusão de cadeias poliméricas em emaranhados de polímeros num meio desordenado. Estudamos a evolução temporal dessas cadeias em redes quadradas e medimos os tempos característicos de transporte para várias situações iniciais e condições de contorno. Introduzimos um ruído congelado (quenched) representado por uma distribuição de obstáculos (impurezas inertes) aleatoriamente dispostas, com concentração  $c$ . Analisamos como os coeficientes de difusão variam com o índice de polimerização das cadeias e como dependem da concentração  $c$ . Estudamos também, em alguns casos particulares, a difusão de polímeros em forma de estrela e polímeros ramificados mais complexos e propomos Leis de Escala para a mobilidade e para a viscosidade.

Investigamos também o caso de reptação através de barreiras retangulares de concentração e de gradientes de concentração de obstáculos fixos. Algumas das configurações pesquisadas levam ao confinamento de polímeros e podem representar formas estáveis de obtenção de misturas poliméricas ou interfaces geradas dinamicamente entre diferentes tipos de cadeias.

Tratamos ainda do problema em que consideramos os obstáculos em movimento executando caminhadas aleatórias sobre a rede e evitando os sítios ocupados. Neste caso os resultados obtidos para coeficientes de difusão mostram um incremento do transporte das cadeias, aparentemente originado do aumento do valor quadrático médio do diâmetro do tudo dentro do qual o polímero consegue se deslocar.

(CAPES, CNPq, FINEP e PADCT)

### Percolation Transition in Conducting Polymer Networks

**J. S. Andrade Jr. e A. A. Moreira**

**Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará**

**60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil.**

The emergence of conducting polymers as a new class of functional materials has been fully recognized, specially due to their importance in basic and applied research and many potential applications in technology. The investigation of their metallic state formation, dimensionality and electrical transport mechanisms responsible for the wide range variation in conductivity with doping has been the main focus of the most recent experimental and theoretical studies on this field. For example, in the case of polyaniline, conductivity changes of nine orders of magnitude can be observed in a very limited range of protonation.

A conceptual model for conducting polymers is proposed in terms of a random resistor network subjected to percolation disorder. This theoretical framework allows for structural and phenomenological aspects of the system to be simultaneously represented. At criticality, significant deviations have been detected from the standard conductivity behaviour in percolating structures generated with a large discrepancy between inter and intrachain conductance elements. This behaviour could be explained in terms of a peculiar finite-size effect and the relevance of the results discussed in context with real polymer systems. As an idealized model for the conducting cluster in the percolation morphology, we also investigate a similar charge transfer mechanism through the Mandelbrot-Given fractal structure. The results from these simulations could be used to elucidate some aspects of electrical transport in real disordered systems close to the percolation transition.

## MICROEMULSION MODEL WITH OIL-WATER ANISOTROPY

*M. Frichembruder and M. C. B. Barbosa*

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

*Palavras-Chave:* Microemulsion, model, anisotropy

We consider a spin model created by Widom applied to oil-water-amphiphilic surfactant mixtures near the region where homogeneous phases coexist with a lamellar phase. We analyze this model assuming that oil and water molecules cannot be treated symmetrically, given that they do exhibit different chemical potentials. Using a mean-field approximation, we find that besides the lamellar phase (sheets) a hexagonal phase (rods) is present in appropriated values of the chemical potentials difference. We also analyze the conditions of stability of the lamellar and hexagonal phases and of other modulated phases that might be present. In order to include the fluctuations, the equivalent continuous model is obtained in the framework of the Lagrangian and Euler-Lagrange equation. In this model fluctuations changes the mean-field as follows, the lamellar phase is the only phase present when the difference between the chemical potential of oil and the chemical potential of water is not too high. Both lamellar and hexagonal phases are present when this difference exceeds a certain value. This value specifies the triple point where the two modulated phases coexist with the disordered phase. This point is present even for small values of the critical wavevector, indicating that the mean-field Lifshitz point is actually a fluctuation-induced endpoint.

1. S. A. Brazovskii, *Sov.Phys.-JETP* **41**, 85 (1975).
2. B. Widom, *J. Chem. Phys* **84**, 6943 (1986).
3. K. A. Dawson, *Phys. Rev. A* **36**, 3383 (1987).
4. P. Upton and J. Yeomans, *Phys. Rev. B* **40**, 479 (1989).
5. M. C. Barbosa, *Phy. Rev. B* **46**, 3672 (1992).
6. M. C. Barbosa and M. Frichembruder, *Phy. Rev. E* **51**, 4690 (1995).

## NEUTRAL POLYAMPHOLYTES IN A IONIC SOLUTION

*Alexandre Diehl, Marcia C. Barbosa and Yan Levin*

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*Palavras-Chave:* Conformation, polymer reactions, order-disorder transformations

Differently from a neutral macromolecules, the behavior of charged macromolecules remains quite unclear. For example, it is believed that polyampholytes (*PAs*), which are copolymers containing both charged and neutral monomers, when in a solution with salt, undergoes a coil-globule transition. This transition was found at high temperatures and assuming that the density of salt is always bigger than the volume fraction occupied by the polymer. Given that, the case of a neutral *PA* chain is analyzed in the framework of the full Debye-Hückel Bjerrum-Flory (*DHBJF*) theory with the chain dissolved in an ionic solution. The *DHBJF* theory, differently from previous works, enables the studies to be done at both high and low temperatures. The association between the counterions and the monomers of the chain is also explicitly taken into account. We find that if the density of the ionic solution is greater than the polymer, at high temperatures the *PA* exists in an extended state with the radius of gyration scaling as  $R \sim aN^\nu$ , with  $\nu = 3/5$ . As the temperature is decreased, the chain collapses into a dilute collapsed state, with  $\nu = 1/3$ . Now, at low temperatures, the association between the free ions of the solution and the charged monomers of the chain will decrease the electrostatic attraction of the system and the *PA* will be extended and the chain behaves as a usual neutral polymer. When the density of the polymer is greater than the ionic solution, at high temperatures, differently from above, the polymer will be always collapsed. At low temperatures, there will be a transition from this diluted collapsed state to an extended state as above. When the density of the salt is lower than some critical density, this transition becomes first-order. Unfortunately this last case is impossible to observe experimentally since the transition temperature is very low. We can conclude that a *PA* in a high density of salt undergoes two phase-transitions: a extended-collapsed transition at high temperatures, confirming previous analysis and a collapsed-extended transition at low temperatures. This last transition was due the dipolar association between the free ions and the monomers of the polymer considered in this work.

## THE KINETICS OF COLLAPSE TRANSITION OF RIGID POLYMERS, AND RANDOM COPOLYMERS A MODELS OF BIOPOLYMER FOLDING

*Kenneth Dawson*  
University College of Dublin

*Palavras-Chave:* polymers, copolymers, kinetics

It has been known that various synthetic polymers exhibit a collapse transition as a function of the solvent quality. In water soluble polymers such as poly-N-Isopropylacrylamide this leads to an upper consolute point where the collapsed globules also phase separate. Such systems are of interest as possible models of biopolymer conformational change, and we briefly discuss them for the purposes of introduction. However, the main interest is in the study of more realistic models of the conformational transitions of DNA, and globular proteins. The essential new features of these systems are a high degree of rigidity for DNA and the fact that proteins have special sequences of hydrophilic units that determine their final shapes. We have developed techniques of non-equilibrium statistical mechanics that are capable of describing the state of these systems across their transitions, thereby for the first time giving us closed equations for the kinetics of folding of the molecules. For the stiff polymer model we find a phase diagram consistent with that known from DNA, and we derive the kinetics of the transition that leads to the compact states. For proteins, following the work of many others in the field we use a random sequence model, and again write out and solve the closed non-equilibrium equations of motion for random copolymers. We compare the results of this study with typical expectations in protein folding community, which has so far focused mainly on equilibrium structure, and then discuss implications for engineering of proteins. We discuss how such ideas as these and others that are currently being studied in the field may be of benefit to experimentalists, and also biomedical applications. However, we also attempt to limit the expectations form model such are currently under discussion in both our work and that of others, and pose some future problems that may address these limitations.

## CALCULO DE LA INTENSIDAD DE FOTOLUMINISCENCIA DE ALAMBRES CUANTICOS A PARTIR DE UN SISTEMA 1D DE ELECTRONES Y AGUJEROS

*Augusto Melgarejo(\*) y Fernando Vericat(\*\*)*

(\*)Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB), Facultad de  
Ciencias Exactas Universidad Nacional de La Plata

(\*\*)Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, Facultad de Ingeniería  
Universidad Nacional de La Plata

*Palabras Claves:* Alambres cuánticos, electrones en 1D, Luttinger

En este trabajo consideramos las funciones de correlación al contacto para un sistema de fermiones moviéndose en una banda de ancho  $\delta$  e interactuando via potenciales de pares proporcionales a  $1/q^2$ . Para este sistema obtenemos una fórmula similar a la de Yashuara sumando solamente los diagramas tipo escalera en la expresión de Goldstone para el corrimiento perturbativo de la energía. En el caso binario, usamos la fórmula resultante para calcular la intensidad de fotoluminiscencia de alambres cuánticos modelados como un sistema de electrones y agujeros.

Del muy buen acuerdo que surge de la comparación con resultados experimentales concluimos:

- El potencial efectivo propuesto hace una buena descripción de las interacciones en un líquido de electron-augero.
- La fórmula obtenida puede ser utilizada para el ajuste de densidades 1D en los cables cuánticos a partir de medidas de fotoluminiscencia.
- En el límite de largas longitudes de onda,  $1/q^2$  introducida en la relación de dispersión en la aproximación RPA, reproduce muy bien el scattering inelástico.

## PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM MEIOS DESORDENADOS

*Claudia Adriana de Sousa Melo e Antônio Fernandes Siqueira*

Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará

Caixa Postal 6030 - Campus do Pici

CEP 60451-970 Fortaleza Ceará Brasil

*Palavras-chave:* condutividade elétrica; processos estocásticos; método Monte Carlo

Consideramos um sistema desordenado constituído por elétrons que podem passear em uma rede que contem um número  $N_a$  de "armadilhas" distribuídas aleatoriamente. Ao caminhar na rede o elétron tem uma probabilidade  $p_x$  de se deslocar ao longo de uma direção maior do que a probabilidade  $p_y$  de um deslocamento com uma mudança de direção. Ao encontrar uma "armadilha" o elétron é aprisionado. Um outro elétron que passe no ponto onde anteriormente havia a armadilha é espalhado de modo que passa ao sítio mais próximo. Inicialmente um número  $N_e$  de elétrons é lançado na rede por uma das "faces", enquanto um número  $N_c$  é coletado na face oposta. Através de simulação Monte Carlo obtêm-se o livre caminho médio para o elétron na sua caminhada. Com este resultado calcula-se a condutividade elétrica do material bem como a sua difusividade térmica. Aplicamos o método para obter o comportamento destas propriedades em um meio constituído por uma mistura de polímeros condutores com um número  $N_a$  de defeitos em um número  $N_c$  de cadeias, e  $N_i$  interseções. As cadeias são confinadas na região entre as superfícies  $x = \pm l$  e  $y = \pm \infty$ . As superfícies  $x = \pm l$  correspondem às "faces" referidas acima, e as cadeias poliméricas consideradas são obtidas de acordo com o modelo de uma caminhada sem interseção indefinidamente crescente (IGSAW). Os resultados para condutividade elétrica são comparados com aqueles obtidos por outros métodos<sup>1</sup>.

1. A Random Network Model for Electrical Transport in Conducting Polymer.

J.S. Andrade Jr., Y. Shibusa, Y. Arai and A.F. Siqueira. Synth. Metals, 68, 167(1995).

## EFEITOS GEOMÉTRICOS NO FOLDING DE MACROMOLÉCULAS

*A. Caliri e M. A. A. da Silva*

Departamento de Física e Química, FCFRP-USP, Ribeirão Preto SP

Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* polímero, folding, Monte Carlo.

Neste Trabalho estudamos efeitos geométricos no *folding* de macromoléculas, através de um modelo de cadeia linear contendo  $N$  monômeros, estrutura tetragonal, e interações do tipo *hard core* entre os distintos pares de monômeros. Para cadeias pequenas, isto é valores de  $N$  variando entre 5 e 16, o sistema foi tratado exatamente, através de enumeração exaustiva das configurações canônicas. Para valores maiores de  $N$ , (até 100), o sistema foi tratado por simulação Monte Carlo.

O número de ângulos possíveis para cada par de monômeros é  $\zeta=3$ , o que é uma decorrência da estrutura da rede (rede do diamante), na qual a cadeia é embebida. Nosso primeiro resultado foi mostrar que  $\zeta$  muda significativamente quando o efeito de volume excluído é considerado. Uma extrapolação para  $N \rightarrow \infty$  dos resultados exatos, revela que  $\zeta_{ef} = 2,760$ . Este resultado é confirmado por simulação Monte Carlo. O raio de giração e distância ponta-a-ponta foram obtidos e seu comportamento para  $N \rightarrow \infty$  foi estabelecido como  $N^\nu$ , com  $\nu \cong 2/3$ . Este resultado difere de outros anteriormente obtidos com o mesmo sistema, porém permitindo loops (correspondendo a ciclanos); aqui, por outro lado, somente cadeias lineares (alcanos) foram consideradas. Também analisamos a frequência canônica com que os distintos pares de monômeros se tocam, e seu significado para o estabelecimento dos *folding pathways* de macromoléculas é discutido.

(FAPESP, CAPES, CNPq)

## Competição entre Caminhantes Aleatórios em 2D

S. R. Gomes Júnior, L. S. Lucena e L. R. da Silva  
Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas - UFRN  
Campus universitário, 59072-970 - Natal - RN

*palavras chave:* caminhantes aleatórios, interface, tempo de cobertura.

Numa rede quadrada de  $L^2$  sítios e com condições periódicas de contorno (um toro)  $N$  caminhantes aleatórios ocupam simultaneamente um sítio qualquer. Estes caminhantes estão divididos em dois grupos distintos; metade dos caminhantes é caracterizada pela cor azul e a outra metade pela cor vermelha. Consideramos o tempo discreto. Em  $t = 0$  todos os caminhantes partem simultaneamente da origem e caminham equiprovavelmente para um dos primeiros vizinhos. Todos os sítios da rede são inicialmente incolores, e quando um sítio é visitado por um caminhante, pela primeira vez, adquire a cor do mesmo de forma irreversível, ou seja, nenhuma visita posterior de qualquer outro caminhante irá alterar o estado de coloração do sítio. Como temos sempre um número finito de sítios na rede, e os caminhantes nunca param de caminhar, o sistema evolui para um estado final onde cada sítio da rede possui uma cor, seja ela azul ou vermelho. Neste estudo fizemos  $N = 2^i$  com  $i = 1, 2, \dots, 10$ . Para cada valor do par  $(i, L)$  foram utilizadas 1000 amostras da evolução da cobertura da rede até o estado final, todas com condições iniciais idênticas. Medimos o tempo de cobertura da rede pelos caminhantes, ou seja, o tempo necessário para que todos os sítios da rede sejam visitados pelo menos uma vez por algum dos caminhantes, e obtivemos que o mesmo é inversamente proporcional ao número de caminhantes, indicando que a distribuição inicial dos caminhantes sobre a rede não influi no processo difusivo. Definimos o número de interfaces como sendo a quantidade de pares distintos de sítios vizinhos coloridos diferentemente e então medimos a dimensão fractal  $d_f$  do conjunto de interfaces formado no estado final de coloração da rede. O expoente  $d_f$  apresenta uma sutil sensibilidade ao número de caminhantes  $N$ , variando consistentemente entre 1.81 e 1.76 no intervalo  $N=2$  a  $N=1024$ . Tal variação pode ser atribuída a uma mudança de regime (*crossover*), ou ao possível caráter multifractal deste modelo.

## SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO EM CRESCIMENTO DE POLÍMEROS

Adriano de Oliveira Sousa, Antonio Fernandes Siqueira

Departamento de Física, Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará

*Palavras-chave:* polímeros, self-avoiding walk, fractal

Macromoléculas são representadas como longas cadeias compostas por pequenas unidades moleculares ligadas por ligações químicas. Desde que estas ligações possuem certos graus de liberdade para rotacionar, então as cadeias são flexíveis e podem exibir muitas diferentes formas espaciais. A aproximação estatística para o problema da descrição destas cadeias moleculares, seu tamanho médio e outras médias relacionadas com as várias distintas configurações está baseada na simulação das cadeias por uma classe de Self-Avoiding Walk, denominado Indefinitely Growing SAW (IGSAW). Para o IGSAW a condição de exclusão de volume não pode ser violada, deste modo o crescimento continua indefinidamente, pois o IGSAW analisa a existência de "gaiolas", evitando uma possível intercepção. Esta propriedade do IGSAW permite-nos gerar longas cadeias de self-avoiding. Investigamos a possibilidade da existência de *bridge*, ou seja, a macromolécula conectar com as duas superfícies. Sendo assim, tratamos o problema segundo um modelo de crescimento, localmente, direcional e anisotrópico. Interpretamos por anisotropia a condição de que a probabilidade para um passo em uma dada direção é diferenciada em relação as outras, e por direcional como sendo que a macromolécula possui maior probabilidade para crescer em uma direção específica. Este fato simula quatro tipos de possibilidades de interação entre a macromoléculas e as paredes, oriundas de: a) interação fraca b) atração c) repulsão. São apresentados resultados das simulações para a função de correlação, raio de giração, número de ligações, dimensão fractal e entropia (Shannon e Tsallis).

## SIMULAÇÕES DE UM MODELO DE CRESCIMENTO CINÉTICO POR UM MÉTODO DE MONTE CARLO

Roberto N. Onody e Ubiraci P. C. Neves

Depto. de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* polímeros, crescimento cinético, diagrama de fases

Desde que as cadeias poliméricas foram originariamente idealizadas por caminhadas aleatórias em redes periódicas, modelos cada vez mais complexos, para explicar a polimerização, têm surgido na literatura. A caminhada aleatória do tipo "self-avoiding" descreve uma cadeia que nunca se intercepta, sendo utilizada como modelo de um polímero linear em solução diluída com bom solvente. Um modelo alternativo que descreve uma cadeia polimérica é o denominado crescimento cinético. Neste, a extremidade da cadeia cresce, a cada unidade de tempo, em direção a um dos sítios primeiros vizinhos não visitados, interrompendo o crescimento se todos os sítios ao seu redor estiverem ocupados. Este modelo foi generalizado a fim de incorporar a possibilidade de ramificações e também a presença de impurezas. Ele exibe uma transição finita-infinita devido à competição entre ramificações e obstáculos. Recentemente, os aspectos topológicos e dinâmicos deste modelo de crescimento cinético foram investigados. Neste estudo, uma transição de rugosidade na superfície do polímero também foi detectada. No presente trabalho, estudamos a polimerização na rede quadrada de uma maneira ainda mais realista. Para este propósito, incluímos, no modelo de crescimento cinético, forças atrativas de curto alcance entre os monômeros. A cada unidade de tempo do crescimento do polímero, empregamos um método de Monte Carlo para obter uma amostra do espaço de configurações. O diagrama de fases que separa os regimes de crescimento finito e infinito é obtido no plano  $(T, b)$  onde  $T$  é a temperatura reduzida e  $b$  é a probabilidade de ramificação. No limite termodinâmico, extrapolamos a temperatura  $T^* = 0.102 \pm 0.005$ , abaixo da qual a fase é sempre infinita. Observamos que a transição de rugosidade é uma transição secundária que se manifesta em todas as temperaturas.

(CNPq)

## DIFUSÃO EM FRACTAIS ESTATÍSTICOS REGULARES

Fábio D.A. Aarão Reis

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* fractais, caminhos aleatórios, escala de tamanho finito

Fractais estatísticos regulares são construídos introduzindo aleatoriedade nas regras de construção de fractais determinísticos [1]. Estas estruturas e outras construídas com regras semelhantes podem servir como modelos para estruturas auto-similares reais. Caminhos aleatórios são simulados em estágios finitos da construção destas redes. Técnicas de escala de tamanho finito, anteriormente aplicadas ao estudo da difusão em fractais determinísticos [2], são usadas para a análise destes resultados. Mostramos que o deslocamento quadrático médio de caminhos de  $N$  passos ( $\langle R_N^2 \rangle$ ) obedece leis de escala em comprimentos acima do parâmetro de rede e abaixo dos tamanhos das redes finitas. Os expoentes de difusão anômala  $\nu_w$  são próximos das estimativas para os fractais determinísticos correspondentes. Resultados em vários fractais são comparados e os efeitos das suas irregularidades sobre  $\nu_w$  são analisados; a presença de trechos finitos sem voltas e, em menor intensidade, a ordem de ramificação finita, são os principais responsáveis pelo atraso da difusão (decréscimo de  $\nu_w$ ) [3].

[1] J.E. Martin e K.D. Keefer, J. Phys. A18, L625 (1985).

[2] F.D.A. Aarão Reis, J. Phys. A28, 6277 (1995); F.D.A. Aarão Reis, Phys. Lett. A, em impressão.

[3] F.D.A. Aarão Reis, submetido ao J. Phys. A, fevereiro de 1996.

(CNPq, FINEP)

## Multiple Invasion Percolation

Roberto N. Onody and Reginaldo A. Zara

Departamento de Física e Informática, IFSC, USP

**Key words:** Fractals, Invasion Percolation, Growth Process

We generalize the standard site invasion percolation model to permit simultaneous invasion of several sites. We propose two kinds of generalizations: one in which the invasion is controlled by the perimeter size and another where the scaling properties command the growth process. The acceptance profile as well as the fractal dimension  $D_f$  are carefully studied. In the model based on scaling relations,  $D_f$  can be treated as a mere real parameter in the range  $(0, \infty)$ . In the intervals  $(0, 91/48)$  and  $(2, \infty)$  the system is frustrated. For  $D_f > 2$  the model exhibits also an interesting *burst* phenomenon. In the region  $[91/48, 2]$ , the clusters obey *exactly* in *any* scale the relation  $M \approx Rg^{D_f}$  between the mass  $M$  and the giration radius  $Rg$ . These stable random fractals may be very useful in the study of dilute systems.

(CAPES)

## TEMPOS DE COBERTURA PARCIAL E ALEATÓRIO EM REDES UNIDIMENSIONAIS

Marcelo Sardelich e Mauricio D. Coutinho-Filho

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE, Brasil

**Palavras chave:** caminhadas aleatórias, tempo de cobertura, transição de fase.

O tempo de cobertura parcial<sup>1</sup> (PCT) é o tempo médio  $t_p$  que leva um caminhante (RW) para visitar uma certa fração ( $f$ ) dos  $N$  sítios da rede. Para o tempo de cobertura aleatório<sup>1</sup> (RCT) os  $m=fN$  sítios que deverão ser visitados são escolhidos aleatoriamente antes do início da caminhada. Neste trabalho são consideradas redes unidimensionais ( $d=1$ ) com condições periódicas de contorno. Ao contrário do que ocorre em  $d=2$ , não existe uma relação de complementaridade entre o PCT e o RCT, isto é, em  $d=1$  os problemas apresentam comportamentos assintóticos diferentes. A análise de nossos dados numéricos, usando o método Monte Carlo, sugerem para o RCT uma transição descontínua no limite termodinâmico:  $t_p/t_c=1/3$  para  $f=0$  e  $t_p/t_c=1$ ,  $0 < f \leq 1$ . Esta descontinuidade foi melhor estudada analisando o comportamento de  $t_p/t_c$  para uma dada fração ( $f$ ) fixa de sítios. Os resultados obtidos, permitem inferir um comportamento de escala para tamanho finito dada por:  $t_p/t_c \sim 1 - CN^\beta$ . Encontramos para o expoente  $\beta \approx 1$ , representando de maneira satisfatória o primeiro termo de correção de escala numa expansão em potências de  $N$ . Assim temos,  $t_p = (N^2/2) \cdot (1 - C'/N)$ ,  $f > 0$ ,  $N \rightarrow \infty$ , em concordância com o valor exato do tempo de cobertura para condições de periódicos de contorno<sup>2,3</sup>  $t_c = (N/2)(N-1)$  e  $t_p = (fN/2)(fN-1)$ .

[1] K.R. Coutinho, M.D. Coutinho, M.A. Gomes and A.M. Nemirovsky, Phys. Rev. Lett. 72, 3745 (1994).

[2] A.M. Nemirovsky, H.O. Martín, M.D. Coutinho, Phys. Rev. A 41 761 (1990).

[3] C.O. Yokoy, A. Hándrez-Machado and L. Ramfres-Piscina, Phys. Lett. A 145 82 (1990).

## PHONON ANOMALIES AT THE SUPERCONDUCTOR PHASE TRANSITION ON THE $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$

Airton A. Martin, J. A. Sanjurjo  
Instituto de Física "Gleb Wataghin" - DEQ - UNICAMP  
and M.J.G. Lee

Department of Physics and Scarborough College - University of Toronto - Canada

*Palavras-chaves: Raman scattering, Bi2212, phonon anomalies*

Since the discovery of the high  $T_c$  superconductivity in the  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  system, a large number of Raman scattering studies have been published to help to assign the observed phonon modes. However, even though several Raman studies have been reported, the assignment of the oxygen vibrational peak of  $A_g$  symmetry is not yet fully settled. In order to clarify the assignments of the vibrational modes in this compound, we have studied both: The oxygen isotopic effect <sup>(1)</sup> and the temperature dependence of their frequencies and their linewidths. In this work we will presenting the temperature dependence of the polarized Raman spectra from the  $ab$ -plane of the two modes at 463 and 287  $\text{cm}^{-1}$ , from 10K to room temperature. We found for these modes a softening of the phonon frequency with an onset just below  $T_c$ . The softening found for the 287  $\text{cm}^{-1}$  mode is twice bigger than the one found for the 458  $\text{cm}^{-1}$ . Also the temperature dependence of the linewidth of the 287  $\text{cm}^{-1}$  mode present a non-linearity behavior just below  $T_c$ . The larger softening of the 287  $\text{cm}^{-1}$  mode could be an indication that this phonon is strongly influenced by the superconducting properties of the Bi2212. This suggest that this phonon involves the motion of atoms in the superconducting planes. This lead we assign the 287  $\text{cm}^{-1}$  phonon to the out-of-plane in-phase vibration of the oxygen atoms in the  $\text{CuO}_2$ -layers. The linewidth anomaly of this mode could be explained on the basis of the strong electron-phonon coupling theory.<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> A.A. Martin and M.J.G. Lee, *Physica C* 254 (1995) 222-232.

<sup>(2)</sup> R.Zeyher and G. Zwicknagel, *Z. Phys. B Condensed Matter*, 78, 175 (1990).  
CNPq/FAPESP

## MAGNETIC PHASE TRANSITIONS IN $\text{RENiBC}$ ( $\text{RE}=\text{Ho}, \text{Er}$ )

D.R.Sánchez, J.C.Tróchez, M.B.Fontes, B.Giordanengo and E.M.Baggio-Saitovitch  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud 150, Urca, 22290-180,  
Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

*Keywords:* Intermetallic Compounds, Superconductivity, Magnetism

A wide variety of properties at low temperatures has been reported for the intermetallic compounds  $(\text{RE}C)_m(\text{T}B)_n$  ( $T$ =transition metal) with  $m=1$ ,  $n=2$  which include: magnetic order, superconductivity and coexistence between magnetism and superconductivity. In order to study these compounds, we have prepared  $\text{RE}(\text{Ni}_{.99}\text{Fe}_{.01})\text{BC}$ , ( $\text{RE}=\text{Ho}, \text{Er}$ ), by standard argon arc-melting method. X-ray diffraction (XRD),  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauer spectroscopy (MS) and  $dc$  resistivity measurements were used to characterize these compounds. The obtained lattice parameters are very close to that obtained for the  $\text{RENiBC}$ , ( $\text{RE}=\text{Ho}, \text{Er}$ ). At 300K the Mössbauer spectra show only a quadrupole doublet for both samples. For  $\text{Ho}(\text{Ni}_{.99}\text{Fe}_{.01})\text{BC}$ , at 4.2K, the spectrum is essentially the same as for 300K, discarding the existence of a magnetic hyperfine field ( $B_H$ ) at the  $^{57}\text{Fe}$  nucleus. This is consistent with the simple commensurated antiferromagnetic spin arrangement of the  $\text{Ho}$  moments, between the  $\text{RE}$  planes, below 10K<sup>1</sup>. However, in the case of  $\text{Er}(\text{Ni}_{.99}\text{Fe}_{.01})\text{BC}$ , a broadened and asymmetric Mössbauer spectrum at 4.2K shows the existence of a  $B_H$  at the  $^{57}\text{Fe}$  nucleus. The fitting of the spectrum was performed considering the angle  $\theta$  between the main component of the electric field gradient  $V_{zz}$  and  $B_H$ . The best result was obtained for  $\theta=0$ , which means  $B_H$  aligned in the  $c$ -axis. This is in agreement with the ferromagnetic spin arrangement of the  $\text{Er}$  moments along the  $c$ -axis, below 4.5K, as measured by neutrons diffraction<sup>1</sup>. The low temperature resistivity curve for  $\text{Er}$  show an anomaly at  $T\sim 4.7\text{K}$  due to the ferromagnetic ordering, while for  $\text{Ho}$  it does not show any anomaly down to 2K. In the case of  $\text{Ho}$  this anomaly could be very small within our experimental sensitivity. In this work we suggest that MS is useful to study spin arrangement in these series, regarding that  $\text{Fe}$  carries no magnetic moment and goes substitutionally at the  $\text{Ni}$  site.

<sup>1</sup> L.J.Chang; *J. Phys. Cond. Matter*, submitted Nov.23 (1995)

(CBPF/CNPq)

## BEYOND BCS WITH THE MOMENT APPROACH: CORRELATIONS ON THE 2D ATTRACTIVE HUBBARD MODEL.

*C.E. Cordeiro, J.J. Rodríguez Núñez.*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave: superconductivity, BCS, local pairing, moments*

By using the moment approach we have constructed the one-particle spectral functions which take into account the effect of correlations on superconductivity in the negative Hubbard model. We propose that the diagonal spectral function is composed of three peaks and the off-diagonal one is composed of two peaks. This ansatz satisfies the first six moments (sum rules) for the spectral functions. The presence of the third band, or upper Hubbard band, strongly renormalizes the two lower bands, making that the energy gap be  $k$ -dependent while the order parameter is pure  $s$ -wave. This shows that the order parameter and the gap are two different quantities. Our set of analytical equations for the unknown variables are self-consistent and have been solved numerically in lowest order of the order parameter. The implications of our calculations for the HTSC superconducting gap symmetry are briefly discussed.

(CAPES, CNPq)

## FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE ELÉTRICA DO $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7-\delta}$

*L. Mendonça Ferreira e P. Pureur*

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*Palavras-Chave: supercondutividade, flutuações, impurezas*

A substituição parcial de átomos de Cu no óxido supercondutor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  por impurezas metálicas origina uma supressão das propriedades supercondutoras e um decréscimo da temperatura crítica  $T_c$  nesses materiais. Em particular, o átomo de Zn tem se revelado como um dos substituintes mais interessantes na medida que esta impureza não-magnética reduz a temperatura crítica mais abruptamente que qualquer outro átomo magnético até o momento estudado. Objetivando investigar o efeito do acréscimo de Zn na transição supercondutora, apresentamos um estudo experimental das flutuações termodinâmicas na condutividade elétrica do  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7-\delta}$  na presença de campo magnético aplicado. Foram estudadas duas amostras policristalinas, obtidas através do método usual de reação de estado sólido, e com concentrações de Zn  $x = 0.02$  e  $0.05$ . O trabalho consistiu na medida da resistividade e da magnetoresistência para baixos valores de campo magnético aplicado. As medidas de resistividade elétrica revelam um forte decréscimo da temperatura crítica como consequência do acréscimo de Zn. A curva da derivada da resistividade em função da temperatura apresenta uma estrutura de dois picos e revela um alargamento da transição supercondutora. A análise da derivada logarítmica da condutividade em relação à temperatura nos possibilitou determinar os expoentes críticos correspondentes aos diferentes regimes que caracterizam a transição. Na região acima de  $T_c$ , observamos um regime dominado por flutuações gaussianas. Decrescendo a temperatura, ocorre a seguir um regime caracterizado por flutuações críticas e cujo carácter não é alterado frente à aplicação de campo magnético. Ainda na fase normal, imediatamente antes da transição, identificamos um regime crítico dominado por efeitos de granularidade microscópica. Abaixo de  $T_c$  identificamos regimes de scaling, cujos expoentes são simétricos àqueles obtidos na fase normal, e que interpretamos como resultantes de flutuações supercondutoras intrínsecas, ou seja, intragranulares. Na região de aproximação à resistência nula, observamos efeitos típicos de sistemas granulares.

(CNPq)

## TRANSIÇÃO RESISTIVA, FLUTUAÇÕES NA CONDUTIVIDADE E LINHA DE IRREVERSIBILIDADE EM $GdBa_2Cu_3O_{7.8}$

J. Roa-Rojas e P. Pureur

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS

**Palavras-Chave:** supercondutividade, flutuações, magnetotransporte

A transição resistiva em amostras policristalinas de  $GdBa_2Cu_3O_{7.8}$  foi cuidadosamente medida e efeitos de flutuações na condutividade elétrica foram estudadas a partir da análise da derivada logarítmica do inverso da condutividade. Esta técnica permite a obtenção dos expoentes críticos sem procedimentos de ajuste com parâmetros livres. Foi possível evidenciar a ocorrência de flutuações genuinamente críticas na fase normal imediatamente acima de  $T_c$ . Além do regime crítico  $XY$ -3D, anteriormente observado em  $YBa_2Cu_3O_{7.8}$ , mostrou-se a ocorrência de um regime dominado por um expoente anômalo  $\lambda \approx 0,14$  que sugere a ocorrência de supercondutividade não-convencional no sistema  $GdBa_2Cu_3O_{7.8}$ . Flutuações Gaussianas, similares às observadas no  $YBa_2Cu_3O_{7.8}$ , são também reportadas. A transição tem lugar em duas etapas evidenciando o efeito da granularidade característica dos materiais policristalinos. Extremamente interessante e novo é a observação de *scaling*  $XY$ -3D na paracondutividade medida abaixo de  $T_c$ . Este regime tornou-se evidente com a aplicação de campos magnéticos fracos que tendem a deslocar os efeitos devidos à granularidade para temperaturas mais baixas, permitindo uma melhor resolução na separação entre esses efeitos e as flutuações genuinamente relacionadas à supercondutividade de *bulk*. Em adição, curvas de magnetoresistência, preparadas em condições ZFC e FC, permitiram a determinação da linha de irreversibilidade no limite de campos fracos (entre 0 e 500 Oe). Um diagrama de fases  $H$ - $T$  é obtido no qual são demarcados os limites de validade dos vários regimes de *scaling* observados, incluindo-se as flutuações na fase normal ( $T > T_c$ ) e na região de aproximação ao estado de resistência nula ( $T_{c0} < T < T_c$ ) onde os efeitos relacionados à granularidade são dominantes.

(Colciencias, CNPq)

## INCREASED RESISTANCE BELOW THE SUPERCONDUCTING TRANSITION IN GRANULAR $Sm_{1.83}Ce_{0.17}CuO_{4-y}$ \*

M. J. R. Sandim,<sup>1</sup> P. A. Suzuki,<sup>1</sup> S. Spagna,<sup>2</sup> S. C. Tripp,<sup>2</sup> R. E. Sager,<sup>2</sup>  
and R. F. Jardim<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Faculdade de Engenharia Química de Lorena, C.P.116,12600-000, Lorena,SP, Brazil

<sup>2</sup> Quantum Design, 11758 Sorrento Valley Road, San Diego, CA, 92121-1311, USA

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C.P. 66318, 05389-970, São Paulo, Brazil

**key-words:** superconductivity, granularity, transport properties.

We have observed an abrupt increase of the electrical resistivity below the superconducting transition in granular samples of the electron-doped superconductor  $Sm_{1.83}Ce_{0.17}CuO_{4-y}$ , which were prepared from a sol-gel precursor. These samples were characterized by electrical resistivity as a function of temperature  $R(T)$  in the range  $5K \leq T \leq 300K$ , changing the excitation current  $I$  in the range  $0.01\mu A \leq I \leq 2000\mu A$ ; and the magnetoresistance  $R(H,T)$  for  $0.0T \leq H \leq 8.8T$ . We found, from the results of dc magnetization, the presence of diamagnetism below 17.5K. The results of  $R(T)$  for the several applied excitation currents showed a semiconductor-like behavior above 17.5K with a little drop of  $R(T)$  around 17.5K. Below this temperature, the magnitude of  $R(T)$  rises notably and it becomes dependent of both the excitation current and the applied magnetic fields. Changes in the excitation current strongly suggest the presence of Josephson coupling below 11K in these granular superconductors. A negative magnetoresistance  $\Delta R$  below  $\approx 17.5K$  was also observed. The magnitude of  $\Delta R$  increases fastly with decreasing temperature. The combined results suggest that such an increase of  $R(T)$  below 17.5K involves the transference of charge between isolated superconducting grains by tunneling of quasiparticles. However, the results are not in quantitative agreement with those predicted by both the two-fluid and the microscopic theories currently used.

\* Work supported by the Brazilian agencies FAPESP under contract No.93/4204-4 and CNPq under contract No.400869/93-1.

## A TRANSIÇÃO SUPERCONDUTORA EM $\text{Eu}_{1,85}\text{Ce}_{0,15}\text{CuO}_{4,y}$ : UMA COMPARAÇÃO COM OS SISTEMAS GRANULARES

Paulo Atsushi Suzuki\* e Renato de Figueiredo Jardim†

\* Faculdade de Engenharia Química de Lorena, SP

† Instituto de Física - Universidade de São Paulo, SP

**Palavras-Chave:** supercondutividade, compostos  $\text{Eu}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ , transição isolante-supercondutor

A transição supercondutora nos sistemas granulares como nos filmes metálicos de In ou Al-Ge tem sido analisada à luz de um modelo baseado em inclusões de metais ou ilhas metálicas em uma matriz isolante. No regime dielétrico, ou seja, quando a fração metálica é pequena e abaixo do limite de percolação, a condução elétrica é dominada por ativação térmica. Este mecanismo depende fortemente da composição e parâmetros microestruturais, tais como o tamanho das ilhas metálicas e a separação entre estas. A condução elétrica nos compostos  $\text{Eu}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$  é comparada com a condução no regime dielétrico dos sistemas granulares. Esta analogia pode ser feita pelo fato de que a substituição de  $\text{Eu}^{3+}$  por  $\text{Ce}^{4+}$  e a remoção de oxigênio da estrutura propicia a introdução de portadores de carga livres e distorções na rede dentro de uma matriz isolante. A morfologia da microestrutura pode ser modificada através de diferentes tratamentos térmicos. Neste trabalho são apresentadas curvas de resistividade elétrica de amostras policristalinas de  $\text{Eu}_{1,85}\text{Ce}_{0,15}\text{CuO}_{4,y}$  tratadas em diferentes atmosferas (argônio, ar e oxigênio) e temperaturas ( $900^\circ\text{C} \leq T \leq 1100^\circ\text{C}$ ). Foram observadas duas formas de condução elétrica abaixo da temperatura de transição supercondutora ( $T < 15\text{K}$ ): (1) na qual se observa o início da transição supercondutora, houve o estabelecimento de supercorrentes através do acoplamento Josephson entre os grãos supercondutores. (2) Observou-se um aumento abrupto na resistividade elétrica abaixo da temperatura de transição supercondutora. Neste caso, provavelmente devido ao fraco acoplamento entre os grãos, acredita-se que a condução ocorra essencialmente por tunelamento de quase-partículas. A análise das curvas de resistividade mostrou também que a condução elétrica de  $\text{Eu}_{1,85}\text{Ce}_{0,15}\text{CuO}_{4,y}$  no estado normal ocorre por um processo termicamente ativado não convencional.

(FAPESP, CAPES)

## STRUCTURAL AND MAGNETIC CHARACTERIZATION OF THE $(\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x)_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_{4,8}$ SUPERCONDUCTING SYSTEM

Jorge Musa\*, Boris Giordanengo, Sergio Garcia\* and Elisa M. Baggio-Saitovitch

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, Brasil.

\*On leave from Universidad de La Habana, Dpto. de Física Aplicada, Cuba.

**Key-words:** superconducting ceramics, effects of doping, structure

The substitution of La for Gd in the  $(\text{La}_{1-x}\text{Gd}_x)_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_{4,8}$  system (T-phase for  $x = 0$ ) has strong effects on the superconducting properties of the parent compound and promotes the appearance of the insulating T\* and T' structures, while the resistivity vs temperature measurements evidence a non-linear behavior attributed to Kondo effect. The study of the  $(\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x)_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}_{4,8}$  system (La-Pr) is particularly interesting, since comparison with the Gd series would give a deeper insight on the role of the size of the rare-earth substituting ion, as well as its magnetic moment and valence, on the superconducting properties and low temperature structural transitions. In this work, samples of the (La-Pr) system with  $x = 0; 0,1; \dots; 1$  were obtained and characterized by X-ray diffraction and magnetic measurements. The solubility limit of Pr in the T-phase is considerable larger than in the Gd case and the reduction of the critical temperature  $T_c$  with doping occurs at a lower rate. Taking into account these results and the behavior of the resistivity and magnetic measurements, we propose that short range (local) magnetic order, with its associated induced moment, does not occur, in such a way that the strength of the magnetic pair-breaking mechanism is strongly reduced as compare with the Gd series. The reduction of  $T_c$  with the Pr concentration was interpreted in terms of mismatch effects between the conduction Cu-O planes and the La-O ones. The strength of the pinning centers associated to defects induced by doping were estimated by Meissner effect fraction measurements.

(CNPq, CLAF)

## Even Hall Effect in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ Crystals with Single Family of Twin Planes

V.N.Morgoon<sup>a,b,c\*</sup>, V.A.Shklovsky<sup>d</sup>, V.Bindilatti<sup>b</sup>, A.V.Bondarenko<sup>c</sup>, R.F.Jardim<sup>b</sup>, C.C.Becerra<sup>b</sup>, A.F.Sartori<sup>a</sup>

<sup>a</sup>FAENQUIL/DEMAR, Urbo Polo Industrial, Gleba AI-6, CP016, CEP12600-000, Lorena, SP, Brazil

<sup>b</sup>Physics Institute, University of Sao Paulo, CP20516, CEP01489, Sao Paulo, Brazil

<sup>c</sup>Kharkov State University, Physics Department, 4 Svobody sq., Kharkov-310077, Ukraine

<sup>d</sup>Kharkov Institute for Physics and Engineering, 1 Akademicheskaya st, Kharkov-310108, Ukraine

Ever since the discovery of superconductivity in the  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , theoretical and experimental investigations of the twin boundaries (TB's) effect on the vortex flux dynamics and pinning have been of great interest. In this report we present experimental evidence of guided vortex motion (GVM) along single family of twin planes, using the measurement of even Hall effect (EHE). Effects of GVM and EHE were observed in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  single crystals ( $T_c \sim 92\text{K}$ ,  $\Delta T_c \sim 0.2\text{K}$ ,  $\rho_{100\text{K}} = 65 \mu\Omega \times \text{cm}$ ) for magnetic fields  $H \parallel$  axis C and  $H \perp j$ , when the system of quasiparallel pinning barriers (TB's) making an angle  $\alpha$  with the direction of transport current  $j$ . The measurements of Hall resistivity  $\rho_{xy}$  and longitudinal resistivity  $\rho_{xx}$  versus magnetic field was made for three single crystals with different Lorenz-force orientations relatively to the TB's ( $\varphi = 90^\circ - \alpha$ ):  $\varphi = 0^\circ$  (TB's  $\parallel F_L$ ),  $\varphi = +45^\circ$ ,  $\varphi = -60^\circ$  in magnetic fields 0-12T at the temperatures 60-100K. The EHE was observed in liquid vortex state between line of solid-liquid vortex phase transition and line of  $Hc_2$  with maximum that is coincidence with the pinning-depinning line ( $I_C = 0$ ). This line is accompanied by typical shoulder in resistivity transition  $\rho_{xx} = f(H)$ . It probably coincides with phase transition in liquid state as well: normal liquid-entanglement (viscous) liquid or 2D-3D coupling-decoupling of vortex. Maximum of the dependence  $\rho_{xy}^{\text{even}} = f(H)$  coincides with minimum of anomaly part of odd Hall resistivity  $\rho_{xy}^{\text{odd}} = f(H)$  was conditioned by superconducting effect. For high temperatures ( $T \leq T_{C0}$ ) and small magnetic fields guided motion of vortices is complete and  $\rho_{xy}^{\text{even}} / \rho_{xx} = E_L / E_j$  (in maximum)  $= ctg\alpha$ . At decreasing temperature and increasing magnetic fields the value of EHE maximum decreases and bigger part of vortices passes through the twin barrier, because Lorenz force is proportional to the magnetic field. At changing the angle  $\varphi = +45^\circ$  into  $\varphi = -60^\circ$  we observed reverse sign of EHE. The observation of EHE, sign reverse of EHE and field dependence of EHE give the direct evidence of GVM phenomena and vortex slipping along array from unidirectional twins. It's shown that the twin planes act as planar pinning barriers for flux flow giving rise to guided vortex motion.

\* e-mail: filor@eu.ansp.br, subject: for Prof.V.Morgoon

## Mixed State Odd Hall Effect in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ with Unidirectional Twins

V.N.Morgoon<sup>a,b,c\*</sup>, V.A.Shklovskij<sup>d</sup>, V.Bindilatti<sup>b</sup>, A.V.Bondarenko<sup>c</sup>, R.F.Jardim<sup>b</sup>, C.C.Becerra<sup>b</sup>, C.A.Shigue<sup>a</sup>

<sup>a</sup>FAENQUIL/DEMAR, Urbo Polo Industrial, Gleba AI-6, CP016, CEP12600-000, Lorena, SP, Brazil

<sup>b</sup>Physics Institute, University of Sao Paulo, CP20516, CEP01489, Sao Paulo, Brazil

<sup>c</sup>Kharkov State University, Physics Department, 4 Svobody sq., Kharkov-310077, Ukraine

<sup>d</sup>Kharkov Institute for Physics and Engineering, 1 Akademicheskaya st, Kharkov-310108, Ukraine

The Hall effect of high  $T_c$  superconductors in mixed state is a subject of great current interest. A major areas are the sign reversal of Hall resistivity  $\rho_{xy}$  near  $T_c$ , scaling behavior  $\rho_{xy} \propto \rho_{xx}^2$  between Hall  $-\rho_{xy}$  and longitudinal  $-\rho_{xx}$  resistivities, and independence of Hall conductivity  $\sigma_{xy}$  on the pinning degree. In this work we have investigated the influence of the twin pinning degree on the odd Hall effect by changing Lorenz-force orientations relatively to the unidirectional twin planes in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  single crystals at  $H \parallel C$ ,  $HLj$ ,  $j \parallel ab$  ( $T_{C0} \sim 92\text{K}$ ,  $\Delta T_c \sim 0.2\text{K}$ ). The field dependences of longitudinal and odd Hall resistivities (0-12T, 60-100K) were obtained simultaneously using 3 samples with different angles between single family twin planes and transport current ( $+45^\circ$ ,  $-30^\circ$ ,  $+90^\circ$ ). We have observed typical sign reversal of the Hall resistivity. Analyzing these data we have determined the Hall conductivity  $\sigma_{xy} = \rho_{xy} / (\rho_{xx}^2 + \rho_{yy}^2)$ . According to the theoretical results of Dorsey et al, Kopnin et al, Vinokur, Feigelman et al the Hall conductivity in mixed state can be presented as a sum of two terms:  $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(S) + \sigma_{xy}(N) = C_1/H + C_2 H$ , where the coefficients  $C_1$  and  $C_2$  are independent on  $H$  but are dependent on the temperature and have different signs. We have used this equation for the analysis of our experimental data. The coefficients  $C_1$  is proportional to  $\tau^2$  and  $C_2$  is proportional to  $\tau$ , where  $\tau = (T_c - T)/T_c$ . In summary, our experimental data show that  $\rho_{xy}$  and  $\rho_{xx}$  exhibit a scaling behavior in the pinning area. We have found that the  $\sigma_{xy}$  behavior can be described by the superposition of two terms which are related to the dissipation inside the vortex core and the moment of quasiparticles for outside the outside of the vortex core. It was shown by us that changing of pinning degree does not change Hall conductivity. So, the picture obtained is in good accordance with the theoretical description and experimental results for detwinned  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  single crystals.

\* e-mail: filor@eu.ansp.br, subject: for Prof.V.Morgoon

## TRANSPORT PROPERTIES OF POLYCRYSTALLINE (Nd<sub>1-x</sub>Gd<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub> COMPOUNDS\*

C. H. Westphal and R. F. Jardim

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C. P. 66318, 05389-970, São Paulo, Brazil

**Palavras-chave:** Josephson coupling, quasiparticle tunneling, superconductivity

We have studied the structural, magnetic, and transport properties of polycrystalline samples of (Nd<sub>1-x</sub>Gd<sub>x</sub>)<sub>1.85</sub>Ce<sub>0.15</sub>CuO<sub>4-y</sub>;  $x = 0.0, 0.05, 0.10, 0.25, \text{ and } 0.50$ ; produced under different atmospheres and cooling rates after the reduction process. From x-ray analysis, we found that the tetragonal T-structure is preserved for all samples studied except those with  $x = 0.50$ . The lattice parameter  $c$  decreases with increasing Gd content which seems to be consistent with the partial substitution of Nd<sup>3+</sup> by Gd<sup>3+</sup> that has a smaller ionic radius. We also found that quenched samples in argon atmosphere exhibit superconducting properties below  $\sim 22$  K. The temperature dependence of the electrical resistivity  $\rho(T)$  displays a striking double resistive superconducting transition with no evidence of zero resistance state down to 1.5 K. The electrical resistivity has a fractional drop of  $\sim 20\%$  at the upper critical temperature  $T_{c1}$  followed by a plateau down to a lower temperature  $T_{c2}$ . We have observed that  $T_{c1} \approx 22$  K slightly decreases with increasing Gd content and is almost field independent. On the other hand, changes in the excitation current and application of magnetic fields up to 0.3 T promote alteration in the behavior of  $\rho(T)$  below  $T_{c1}$ . Also, the behavior of  $\rho(T)$  below  $\approx 3$  K is almost field independent. These observations suggest that: (1) these compounds can be understood as a disordered weakly coupled Josephson network; (2) quasiparticle tunneling can be relevant on the mechanism of charge transfer below  $T_{c1}$ ; and (3) phase slippage can be important at low temperatures.

\* Work supported by the Brazilian agencies FAPESP (contract No. 93/4204-4) and CNPq (contract No. 400896/93-1).

## PSEUDO-QUATERNARY BORO-CARBIDES: A CPA MODEL.

Celso M. da Silva<sup>1</sup>, D. E. Brandão<sup>2</sup> and A. A. Gomes<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Dep. Física - UFSM; <sup>2</sup> Instituto de Física - UFRGS; <sup>3</sup> CBPF/CNPq

**Palavras-Chave:** boro-carbides, CPA, specific heat, magnetic properties

We use an homothetic band model for a compound with two sub-lattices  $A$  and  $B$  [1]: in  $B$  we have  $Ni$  or the selectively dissolved  $3d$  transition impurities with energy levels  $\epsilon^{imp}$  and in  $A$ , the rare earth atoms. This homothetic model should reproduce the published [2]  $3d$  density of states of pure  $YNi_2B_2C$  and this fixes the parameters. From the results of [1] we calculate, using CPA, the propagators  $G_{ij}^{3d}$  and  $G_{ij}^{4d}$  in the presence these selectively introduced impurities in the sublattice  $B$ . The observed specific heat is given by  $\gamma^{exp}(x) = \gamma_{CPA}^{calc}(x, \epsilon^{imp})[1 + \lambda(x)]$ , the electron-phonon interaction  $\lambda(x)$  been extracted from the the measured  $T_c(x)$  [3] using the Allen-Dynes formula [4]. When the specific heat measurement is available, this procedure fixes the impurity energy level. Consider now the case of  $Ho$  compounds doped with the same transition metal impurities. We use a similar formalism for  $Ho(Ni_{1-x}Tx)B_2C$  as that used in the Heusler compounds  $(Ni_{1-x}Co_x)_2MnSn$  [5]. We start from the propagator  $G_{ij}^{4d}(\epsilon, x; \epsilon^{imp})$ , as derived from the homothetic band model and we follow the same steps of [5]. Using perturbation theory we find the effective coupling between rare earths  $J^{eff}(R_i - R_j; x)$ . Contrary to the case of Heusler ferromagnetic compounds, in the present case, we introduce the angle  $\theta$  defining the antiferromagnetic spiral; we sum over magnetic sites, the minimization respect to  $\theta$  indicates the way impurities affect the magnetic order and consequently how the reentrancy is affected or not.

References: 1) N. A. de Oliveira and A. A. Gomes, J. Mag. Magn. Mat. 114 (1992) 283; 2) P. Ravindram, S. Sankaralingam and R. Asokamani, Phys. Rev. B52 (1995) 12921; 3) M. A. S. Boff, G. L. F. Fraga, D. E. Brandão and A. A. Gomes, J. Mag. Magn. Mat. (1996) in press; 4) P. B. Allen and R. C. Dynes, Phys. Rev. B12 (1975) 905; 5) C. M. da Silva, D. E. Brandão and A. A. Gomes, J. Mag. Magn. Mat. (1996) in press.

CNPq

## CONSTANTES ELÁSTICAS DA REDE DE LINHAS DE FLUXO DE ABRIKOSOV PARA SUPERCONDUTORES ANISOTRÓPICOS UNIAXIAIS

*Flávio Mello Rodrigues d'Almeida - Silvana Maria Weinschütz*  
Departamento de Física da PUC/R.J. - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

*Palavras-Chave:* London, constantes elásticas, anisotropia

Os supercondutores com temperaturas críticas altas são fortemente anisotrópicos, satisfazendo quase perfeitamente uma simetria uniaxial. O estado ordenado da rede de linhas de fluxo é determinado para supercondutores uniaxiais, confirmando-se tratar apenas de uma rede de Abrikosov distorcida. Usando um formalismo vantajoso pois permanece válido no caso de linhas curvas, calcula-se o custo energético para deslocar linhas de fluxo retas e paralelas de suas posições de equilíbrio. Tomando apenas o termo quadrático no deslocamento médio das linhas de fluxo, o módulo elástico de compressão é calculado, mostrando ser neste caso único.

O estudo de propriedades da rede de linhas de fluxo, tais como flutuações térmicas ou estabilidade, exige o conhecimento da energia elástica associada ao deslocamento das linhas de fluxo de suas posições de equilíbrio. Resolvendo diretamente as equações de London para um supercondutor anisotrópico uniaxial, no domínio em que o módulo da indução magnética é muito menor que o campo crítico superior e que a direção da indução magnética é arbitrária em relação aos eixos principais do cristal, chega-se a uma expressão para a energia livre elástica total. A partir da qual, por um processo de expansão em torno da configuração de equilíbrio das linhas de fluxo, calcula-se os módulos elásticos de compressão, cisalhamento, inclinação e um outro. Este último se anula em arranjos geométricos muito simples, onde o paralelismo da indução magnética com o eixo de simetria do supercondutor é satisfeito.

## NORMAL STATE MAGNETISM OF Zn DOPED AND OXYGEN DEFICIENT $\text{CaLaBaCu}_3\text{O}_7$ SUPERCONDUCTOR.

V.P.S. Awana, D. A. Landinez Tellez and J. Albino Aguiar,

Depto. de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901, Recife, PE, Brasil.

and

Rajveer Singh and A.V. Narlikar,

National Physical Laboratory, K.S. Krishnan Marg, New Delhi, 110012, India.

Both on-site Zn substitution or the oxygen deficiencies in the  $\text{CaLaBaCu}_3\text{O}_7$  system decreases the superconducting transition temperature  $T_c$  of the pristine sample. We observed that the normal state magnetism, done in a field of 5 K Oe, shows a similar curie-weiss behaviour, in terms of a localized magnetic moment, presumably on Cu, in both the cases. The pristine system, i.e. without Zn substitution or the oxygen deficiencies, showed a weakly temperature dependent small magnetic susceptibility, in the normal state, i.e. above  $T_c$ . It has been argued that the normal state magnetism of HTSC systems plays a vital role in deciding the  $T_c$  of these materials.

**Key Words:** HTSC systems,  $\text{CaLaBaCu}_3\text{O}_7$  superconductor, Oxygen deficiencies, and Normal state magnetism.

## REDE DE LINHAS DE FLUXO EM FILMES SUPERCONDUTORES TIPO-II

*Flávio Mello Rodrigues d'Almeida - Gilson Matheus Carneiro*  
Departamento de Física da PUC/R.J. - Instituto de Física da UFRJ

*Palavras-Chave*: London, filme, constantes elásticas

O campo magnético e a densidade de supercorrente produzidos por uma distribuição arbitrária de linhas de fluxo no interior de um filme supercondutor tipo II, de espessura  $D$  comparável à profundidade de penetração  $\lambda$ , são calculados analiticamente. Para o que resolve-se as equações de London e as equações de Maxwell utilizando o método das imagens. Até o presente momento conhecia-se na literatura apenas o limite onde  $D \gg \lambda$ .

A partir desse resultado, uma expressão para a energia da distribuição de linhas de fluxo é obtida analiticamente. Essa expressão quando escrita em termos das interações entre linhas de fluxo reais e entre as linhas e suas imagens, permite o cálculo analítico dos potenciais de interação vórtice-vórtice e vórtice-imagem, o que leva ao conhecimento das modificações nesses potenciais devido à existência, no filme, de duas interfaces supercondutor-vácuo, separadas por uma distância  $D$  comparável à  $\lambda$ . Com base nesses resultados, são calculadas a estrutura espacial da rede de linhas de fluxo de equilíbrio e as propriedades elásticas desta rede, isto é, seus módulos elásticos conseguidos da expansão da energia livre em torno da distribuição que a minimiza.

## SPIN DYNAMICS IN $RE_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ T'-PHASE STUDIED BY MÖSSBAUER SPECTROSCOPY

*Ada López, M.A.C. de Melo, D. Sánchez, I. Souza Azevedo, E. Baggio-Saitovitch and F.J. Litterst\**

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ, \*TU - Braunschweig - Germany

*key-words*: superconductors, Mössbauer, relaxation

Many studies of high- $T_C$  superconductors have focused on the modification of the magnetic properties as the number of carriers is varied. The  $(La_{1-x}Gd_x)_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$  system changes from a superconducting to a paramagnetic and finally to an antiferromagnetic material with increasing Gd concentration, the local Cu-O<sub>2</sub> units being an octahedron (T-phase), a pyramid (T\*-phase), and a square (T'-phase). We have studied the Mössbauer spectra of the T'-phase using  $^{57}Fe$ , as probe in the samples  $RE_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ , where RE are the rare-earth Gd and Eu.

The room temperature  $^{57}Fe$  Mössbauer spectra on Gd and Eu samples indicate that there are three sites present, presumably associated with the *ideal* T\* fivefold pyramidal site (C), and the *ideal* T' fourfold site (E) and an interstitial oxygen site (D).

At 4.2K no clear magnetic hyperfine pattern is found for Gd and Eu samples only rather a broad line. The spectral lineshapes can be described by relaxation processes due to spin flip-flop.

The relaxation effects observed in  $RE_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$  samples are seen in terms of frustration of an antiferromagnetic order in the Cu planes caused by the Cu-Cu ferromagnetic interaction by magnetic O. These frustration effects are not caused by the onset of the three dimensional interactions corresponding to the magnetic Gd ions between the Cu-O planes, since these same frustration effects are also observed in this system with nonmagnetic Eu ions.

(CNPq)

## ANÁLISE DE SCALING PARA A TRANSIÇÃO SUPERCONDUTOR-ISOLANTE INDUZIDA POR CORRENTE ELÉTRICA

*C. A. M. Santos, A. J. S. Machado,*

Grupo de Supercondutividade, Departamento de Engenharia de Materiais, FAENQUIL,  
12.600-000 Lorena - SP

*S. Moehlecke e Y. Kopelevich*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade de Campinas, UNICAMP,  
13.083-970 Campinas - SP

**Palavras-Chave:** transição supercondutor-isolante, scaling, corrente elétrica

Os materiais supercondutores desordenados tem atraído muita atenção ao estudo da transição supercondutor-isolante (SIT) durante os últimos anos. Vários resultados experimentais tem sido reportado na literatura para sistemas bidimensionais (2D) com a SIT induzida por aumento da desordem ou campo magnético. No início desta década, uma teoria de scaling foi desenvolvida para descrever as SIT, na qual foi previsto que o aumento de desordem causa a localização de pares de Cooper e a aplicação de campo magnético induz uma transição do estado Vortex-glass para Bose-glass. Neste trabalho, nós temos realizado uma transição do estado supercondutor para isolante em uma amostra policristalina de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.46}\text{Pr}_{0.54}\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$  aplicando-se corrente elétrica. Usando as idéias básicas da teoria de scaling para sistemas 2D, foi possível propôr uma função de scaling entre a resistência elétrica e a densidade de corrente. Os resultados da análise de scaling apresentaram dois comportamentos universais para os estados supercondutores ( $J < J_C$ ) e isolante ( $J > J_C$ ), similarmente aos resultados reportados para as SIT induzidas por campo magnético. A excelente concordância entre os resultados experimentais e a teoria de scaling tem sido interpretada como uma prova da relação de scaling entre a resistividade e a densidade de corrente em nossos experimentos.

(CNPq)

## MEDIDOR DE ENERGIA E POTÊNCIA LASER ( LM-07 )

*Raúl Hernández Tabares, Juan Gualberto Darias, Fernando Reizel*  
IPRJ-UERJ / CEADEN

*Palavras-Chave:* radiômetro, potência, energia

Este trabalho apresenta todo o processo de desenho e calibração de um medidor digital automático de energia e potência da radiação laser ( LM-07 ). O medidor é composto de uma unidade central de processamento analógico-digital e três cabeçotes sensores de potência e/ou energia laser. Cada cabeçote é constituído por um elemento sensor ( cerâmica piroelétrica, fotodiodo e termopilha ) e um preamplificador específico que garante uma calibração independente, um ajuste de zero do sinal medido e uma melhor relação sinal-ruído.

É mostrado um cabeçote piroelétrico para medir energia entre  $10\mu\text{J}$  e  $100\text{mJ}$  na faixa de  $250\text{nm}$  até  $20\mu\text{m}$  baseado numa cerâmica piroelétrica PZT(La). O sensor tem uma área de  $200\text{mm}^2$  e uma camada absorvente protetora aos efeitos das altas densidades de energia. Como medidor de potência média entre  $10\text{mW}$  e  $100\text{W}$  na faixa de  $250\text{nm}$  até  $20\mu\text{m}$  foi desenvolvido um cabeçote térmico baseado numa termopilha de filmes finos. A partir de um fotodiodo e um difusor ótico foi desenvolvido um cabeçote fotoelétrico para medir valor de energia e/ou potência média de  $10\text{nJ}$  até  $10\text{mJ}$  e de  $10\mu\text{W}$  até  $100\text{mW}$  respetivamente na faixa espectral de  $350\text{nm}$  até  $1100\text{nm}$ . Para cada cabeçote sensor são mostradas as curvas de calibração, dependência da medida da densidade de potência, do erro de ângulo e do erro de zona.

A unidade central de processamento garante medidas de energia em regime pulsado até uma frequência de  $20\text{ Hz}$ , tem saída analógica BNC e serial RS-232, display de 4 dígitos, realiza uma média de medidas na razão 1/10/100, auto range na medição de potência, ajuste do nível zero de medição tudo isto controlado a partir de um teclado de membrana. A unidade central de processamento consta de uma calibração específica para vários comprimentos de onda para cada um dos três cabeçotes.

( FAPERJ, UERJ, CAPES )

## ELABORAÇÃO DE UM PROGRAMA DE AQUISIÇÃO E TRATAMENTO DE DADOS EMPREGADO NA ESPECTROSCOPIA FOTOACÚSTICA

Antonio Adilton Oliviera Carneiro, Sávio Frederico de Oliveira Ceita e Ossamu Nakamura  
Instituto de Física- Universidade Federal da Bahia

*Palavras Chaves:* Fotoacústica, Espectroscopia, Software

Este trabalho tem como objetivo a construção de um software gerenciador de aquisição e tratamento de dados dos diversos tipos de experimentos que são realizados no Laboratório de Fotoacústica do Instituto da Física da UFBA. Este programa opera em ambientes Windows e foi elaborado em linguagem Visual Basic. Neste laboratório, emprega-se a espectroscopia fotoacústica para a caracterização de propriedades óticas e térmicas de materiais. As técnicas que ordinariamente são utilizadas basicamente são, a de varredura de comprimento de onda e a varredura de frequências. Na primeira técnica, obtemos espectros de absorção fotoacústica que são normalizados, em situações onde o espectro está sujeito a um nível de ruído muito grande, são "alisados". Na varredura de frequências, é feito um pré estudo dos resultados e, através da análise da variação do sinal com a frequência de modulação, o mecanismo preponderante na geração do sinal fotoacústico pode ser estabelecido. Essa informação é fundamental em situações como na determinação da difusividade térmica ou do tempo de relaxação não radioativo de uma determinada amostra.

Pode ser feito também ajustes de curvas, que consistem na determinação dos parâmetros de uma dada curva teórica que melhor se adequa aos dados experimentais. Isto é feito através do método dos mínimos quadrados para funções lineares, empregando-se o procedimento indicado por Marquardt, que consiste na interpolação do método gradiente com o método analítico.

(Orgão Financiador, CNPq)

## MONTAGEM ÓTICA PARA O ESTUDO DE MATERIAIS UNIFORMEMENTE PRETOS E OPACOS

*Gerson Kniphoff da Cruz*

Departamento de Física - Universidade Estadual de Ponta Grossa - PR

*Heitor Cury Basso e Renê Ayres Carvalho*

Departamento de Física e Informática - Instituto de Física de São Carlos - USP - SP

**Palavras-Chave:** excitação, emissão, espectros

A técnica de luminescência tem se mostrado uma ferramenta sensível no estudo de elementos terras-raras como dopantes de materiais cerâmicos supercondutores. Entretanto, a obtenção de espectros de emissão e excitação para o estudo de materiais uniformemente pretos e opacos tem sido rara. Resultados de luminescência mostrando linhas do elemento terra-rara como dopante em  $\text{La}_{1,85-x}\text{Re}_x\text{Sr}_{0,15}\text{CuO}$  foram reportados em 1987 por Tissue e Wright<sup>(1)</sup>. Flores et.al. em 1994 apresentaram resultados em materiais supercondutores do tipo  $\text{EuBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ <sup>(2)</sup>. A grande dificuldade da aplicação da técnica de luminescência é a natureza da superfície da amostra. Devido a sua opacidade o sinal luminoso é pequeno. Assim sendo, fazendo uso de um espelho esférico de 150mm de raio idealizamos um novo arranjo ótico para aumentar a performance de recolhimento de luz no ramo de detecção. Utilizando como fator de comparação a abertura ótica (A) ( $A=L_3/p^2$  onde  $L_3$  é a área iluminada do elemento analisado e p a distância entre o elemento analisado e a fonte) obtivemos para uma montagem convencional, em nosso laboratório, um limite de  $A = 0,0452$  para o ramo de detecção. Na nova montagem esse fator teve um aumento de 13,9 vezes passando a ser de 0,628. Como resultados preliminares obtivemos alta eficiência na montagem para medidas de excitação o mesmo não ocorrendo para as de luminescência. Como fonte excitadora a montagem permite a utilização de um laser de corante ou de argônio podendo ainda serem utilizadas lâmpadas de mercúrio, xenônio ou tungstênio. O sistema pode operar no intervalo de temperatura ambiente à de nitrogênio líquido.

<sup>(1)</sup> Brian M. Tissue e John C. Wright, *J.Lumin.*,37(1987)117-121

<sup>(2)</sup> C.Flores J. et.al., *J.Lumin*,59(1994)257-262

## O LASER COMO SENSOR REMOTO DA ATMOSFERA

*Marden H. S. Souza, P. P. Batista, B. R. Clemesha, D. M. Simonich.*

Divisão de Aeronomia, INPE, São José dos Campos, SP.

**Palavras-Chave:** Laser, espalhamentos, atmosfera

Quando um feixe de laser interage com partículas presentes na atmosfera podem ocorrer diversos tipos de espalhamento, dependendo do comprimento de onda do laser e da natureza das partículas presentes na atmosfera: espalhamento Rayleigh pelos constituintes majoritários ( $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ), espalhamento Mie por aerossóis estratosféricos, espalhamento ressonante e espalhamento Raman. O radar de laser ou LIDAR (*Light Detection and Ranging*) é um equipamento para sensoriamento remoto ativo da atmosfera que utiliza o mesmo princípio dos radares convencionais. Seu funcionamento consiste basicamente na transmissão e recepção da luz quase monocromática radiada por um laser pulsado. Uma pequena fração desta luz é retroespalhada por átomos e moléculas presentes na atmosfera, sendo detectada por meio de um tubo fotomultiplicador (PMT). A análise temporal do sinal retroespalhado provê informações a respeito da estrutura e composição da atmosfera em função da altura. Cada um destes tipos de espalhamento permite obter, no mesmo experimento, diferentes parâmetros atmosféricos na região de 30-105 km de altura. O grupo de Física da Alta Atmosfera (FISAT) do INPE opera um radar de laser em São José dos Campos ( $23^\circ \text{S}$ ,  $46^\circ \text{O}$ ) desde o final da década de 60. As primeiras medidas, com um laser de rubi, possibilitaram o estudo da distribuição de aerossóis estratosféricos (~30-35 km). A partir de 1972, com a instalação de um laser de corante sintonizável a 589 nm, tornou-se possível medir também a densidade de sódio mesosférico (80-105 km). Em 1993, com a aquisição de um laser comercial (CANDELA Modelo LFDL-20) com maior energia e número de disparos, o radar de laser foi adaptado para também medir a densidade e a temperatura atmosféricas entre 35 e 70 km. Neste trabalho apresentamos nosso experimento do radar de laser e suas diversas aplicações para sondagem atmosférica, bem como os principais resultados obtidos em 25 anos de operação.

## EXTENSÔMETRO A FIBRA ÓTICA PARA MEDIDA DE DEFORMAÇÃO EM ESTRUTURAS DE CONCRETO.

*André de Jesus, Renato Amaro Zângaro, Marcos Tadeu T. Pacheco*

CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

*Palavras-Chave : sensores, estruturas, fibras*

Estruturas de concreto em obras de grande porte requerem um alto fator de segurança, onde dilatações provocadas pela variação de temperatura ou sobre-carregamento podem causar danos irreversíveis. O extensômetro aqui proposto baseia-se no fator de acoplamento ótico da radiação luminosa entre duas fibras óticas alinhadas axialmente, tendo como função o monitoramento em tempo real destas dilatações. As fibras óticas utilizadas são solidárias à estrutura de concreto submetida ao ensaio, de forma que, deformações impostas à esta estrutura induzam variações no acoplamento ótico entre as fibras. O extensômetro em questão utiliza duas fibras óticas com diâmetro de núcleo de 140µm alinhadas no interior de um capilar com diâmetro interno de 150µm e externo de 5mm. Este conjunto é inserido no interior da estrutura na fase de concretagem. Este experimento utiliza um laser de He-Ne fornecendo 1mW de potência acoplado à uma das fibras; a detecção é realizada por um detector posicionado na extremidade da outra fibra. Cálculos baseados em ótica Gaussiana demonstram que a máxima variação no acoplamento ótico ocorre quando as fibras estão separadas por uma distância de 8mm, onde a sensibilidade calculada neste caso é igual a 52,26 m<sup>-1</sup>. Os resultados experimentais foram obtidos em um protótipo fabricado no CEPEDEX/UNIVAP apresentando ótima consistência com o desempenho previsto teoricamente; as medidas de variação de luz acoplada quando a viga é submetida a diversos ensaios, mostram a viabilização técnica deste tipo de sensor. (UNIVAP)

## ADAPTAÇÕES EM UM ESPECTRORADIÔMETRO COMERCIAL PARA PERMITIR A MEDIDA DO RUÍDO E A OBTENÇÃO DA DETECTIVIDADE EM DETECTORES INFRAVERMELHO

*C.J.M.Albuquerque<sup>1</sup> - W.N.A.Pereira<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Lab. de Radiometria e Optrônica - Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/CTEx - <sup>2</sup>Depto de Eng. Elétrica - Universidade de Taubaté

*Palavras - chave:* Infravermelho - Espectroradiômetro - Detectividade

Entre outros aspectos importantes, todo sistema infravermelho (IV) é dimensionado e avaliado em função do desempenho optoeletrônico do detector que emprega. Parâmetros característicos fundamentais, relacionados com a resposta à radiação incidente, quando medidos, definem, direta ou indiretamente, a qualidade de resposta e a confiabilidade do dispositivo. Entre os mais frequentemente encontrados nas folhas de especificações técnicas, os principais são: Responsividade (R), Potência e Irradiância Equivalente de Ruído (NEP e NEI), Detectividade (D) e Detectividade Específica (D\*), Resposta em Frequência e Constante de Tempo, que constituem as *figuras de mérito* do detector de IV e descrevem o seu desempenho optoeletrônico final. Em particular, a NEP, a D e a D\*, parâmetros que dependem diretamente da medida do ruído do dispositivo, são essenciais na definição desse desempenho. Espectroradiômetros comerciais são disponíveis para realizar a medida destas figuras de mérito. A maioria, entretanto, possui recursos para medir apenas a mais simples destas figuras de mérito, ou seja, a Responsividade. Tomando por base um espectroradiômetro comercial originalmente com recursos apenas para a medida da Responsividade, em uma frequência fixa de modulação, modificações foram implementadas a partir do estudo da filosofia funcional do sistema e de seus módulos de circuitos internos. Empregando-se um "lock-in" externo com um "chopper" de frequência variável, chegou-se a um novo sistema, capaz de realizar medidas de ruído do detector e das demais figuras de mérito dependentes deste parâmetro. O conjunto completo foi aplicado a várias amostras comerciais, tendo sido os resultados comparados com as folhas de especificações técnicas ou cartas de calibração destes detectores, obtendo-se resultados amplamente satisfatórios.

## BRAÇO SENO PARA UM LASER DE CORANTE

*R.B. Barthem, M.A. de Oliveira*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro - R.J.

*Palavras-Chave:* laser de corante, varredura, braço-seno.

O controle da variação do comprimento de onda em um laser de corante pulsado é um dos pontos críticos na elaboração do sistema. O problema básico consiste em girar uma rede de difração, que faz o papel de uma das paredes da cavidade do laser de corante, de forma a sintonizar o comprimento de onda da radiação ressonante. Como a aplicação deste laser visa o estudo de interações da ordem de  $0,1\text{cm}^{-1}$ , o que na faixa do visível corresponde aproximadamente a uma resolução espectral de  $\delta\lambda \approx 0,025\text{Å}$ , é necessária uma resolução angular da ordem de  $\delta\theta = 10^{-6}$  graus. A solução clássica para este problema consiste na construção de um braço seno que, além de permitir a multiplicação do fator de resolução angular, lineariza a relação ângulo varrido com deslocamento no comprimento de onda.

Neste trabalho apresentamos um laser cujo sistema de varredura possibilita uma resolução, no posicionamento da rede, de  $\delta\lambda = 0,0024\text{Å}$ . A montagem escolhida se baseia em um trilho de seção reta em *rabo de andorinha*. A varredura do comprimento de onda é controlada por computador e pode ir a até  $7,2\text{Å/s}$  ou  $432\text{Å/min}$ .

(Apoio: FAPERJ, CNPq)

## RECONSTRUCTION OF THE DIELECTRIC CHARACTERISTICS OF A 3-DIMENSIONAL OBJECT BY USE OF THE COUPLED DIPOLES METHOD

*Thierry J. Lemaire, Amin Bassrei and Kleber C. Mundim*

Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

*palavras-chave:* electromagnetic scattering, coupled dipoles method, inverse problem

The electromagnetic scattering phenomena are of great importance because of their numerous applications in various fields. One of these applications is the study of the dielectric properties of an object, using microwave imagery techniques, a non invasive and non destructive one. Numerical methods such the moment method [1] are currently used to solve this kind of inverse problem, using the integral formulation of the field. In this work, we propose an algorithm to reconstruct the dielectric permittivity of a single object of dimensions comparable to the wavelength, using the knowledge of the near electric field in a discrete set of points. In order to describe the scattered electric field, the coupled dipoles method, a powerful and flexible low frequency method introduced in 1973 by Purcell and Pennypacker [2], is employed. In this model, the scatterer is modeled by a set of polarizable spherical subunits located at the sites of a cubic lattice, and whose polarizabilities are given by the Clausius-Mossotti relation. The formulation of the inverse problem leads to a system of linear complex equations that we solve by the use of the singular value decomposition method when the number of dipoles is small (about 100), and a gradient method in the other cases. Some synthetic examples related to objects of simple geometries are presented and show the feasibility of the method for dielectric weakly absorbing objects of moderate refractive indexes (close to 1).

[1]: S. Caorsi, G.L. Gragnani and M. Pasorino, "Redundant electromagnetic data for microwave imaging of three dimensional dielectric objects", IEEE Trans. Ant. Prop. 42, p. 581-589 (1994).

[2]: B.T. Draine and P.J. Flatau, "Discrete dipole approximation for scattering calculations", J. Opt. Soc. Am. A11, p. 1491-1499 (1994).

(CNPq)

## UTILIZAÇÃO PRÁTICA DE UM FILME FOTOGRÁFICO EM HOLOGRAFIA

*E. Ferrara, S.D.M. Silva, N. Soldá, M. Muramatsu*  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* filme, rede holográfica, interferometria.

Nesta experiência utilizou-se conceitos básicos de óptica interferométrica e difração holográfica, para determinar a qualidade de um filme fotográfico, na utilização do mesmo em experiências holográficas, cujas características são previamente conhecidas. Neste trabalho, primeiramente, realizamos o levantamento da curva característica do filme fuji HR-II e em seguida produzimos e caracterizamos redes de difração holográficas, entre 100 e 400 linhas/mm. A curva característica de um filme consiste na relação entre a densidade óptica e o logaritmo da energia de exposição no filme. A curva é abordada sob a forma experimental, onde na experiência é usado um laser de He-Ne; sendo que o arranjo é bastante simples e constituído por um obturador, um diafragma e um filtro-espacial. Após traçarmos a curva característica do filme fotográfico, pudemos estudar a sensibilidade de emulsão à exposição do filme e determinar a energia adequada que deve incidir sobre o filme, para um melhor registro da holografia. Em seguida confeccionamos uma rede de difração holográfica. A rede de difração pôde ser gerada pela interferência de dois feixes de luz coerente (em nosso caso o laser expandido) impressos na emulsão do filme fotográfico de uma maneira simétrica. Para isso, montamos um arranjo experimental bastante simples constituído por um laser, um divisor de feixe, três espelhos, um diafragma, um expansor e um filtro-espacial. Após confeccionada a rede, comprovamos sua eficiência a partir da difração produzida ao incidir um feixe laser no filme revelado, quando constatamos a presença de várias ordens de difração. Este experimento, além de demonstrar diversas técnicas ópticas, permitiu a produção de redes de difração de baixo custo que podem ser utilizadas em outras experiências de ensino de física.

(trabalho realizado com o apoio do CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO DE FOTOPROTETORES

*Marcos de Castro Carvalho<sup>1</sup>, Regina Célia da Silva Barros Allil<sup>1</sup>, Rubem Cruz de Aragão<sup>2</sup>*  
<sup>1</sup>Laboratório de Optrônica e Sensores/ <sup>2</sup>Laboratório de Materiais/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Centro Tecnológico do Exército

*Palavras-Chave:* fotoprotetor, sol, transmitância

Neste trabalho foi desenvolvido uma metodologia para medida de transmitância nos fotoprotetores usuais, em todo o espectro de emissão solar. A radiação solar compreende uma faixa que estende-se desde o ultra-violeta (0,19  $\mu\text{m}$ ) até o infravermelho (10,00  $\mu\text{m}$ ). 99 % da radiação situa-se entre 0,27  $\mu\text{m}$  a 5,00  $\mu\text{m}$ . A energia que alcança ao solo é da ordem de 140 mW/cm<sup>2</sup>, dividida em 50% de infravermelho, 40% visível e 10 % ultra-violeta (biologicamente mais ativa). Esta última provoca múltiplas reações metabólicas e biológicas no homem. A metodologia consiste no uso de um mono-cromador modelo 753-IR (Optronic Laboratories Inc), uma caixa porta-amostra confeccionada por 2 lâminas de quartzo, fixadas por pinças apropriadas, no qual são colocadas em seu interior o fotoprotetor específico. A solução é devidamente comprimida, formando uma fina película delgada e localizada no alinhamento compreendido entre a saída do monocromador e o encapsulamento do detector. Utilizando uma lâmpada de arco de mercúrio e detectores foto-voltaicos: Si (0,25 a 1,1  $\mu\text{m}$ ), PMT (0,20 a 0,80  $\mu\text{m}$ ), Ge (0,80 a 1,80  $\mu\text{m}$ ) e do tipo fotocondutivo PbS (0,80 a 3,0  $\mu\text{m}$ ) além de piro-elétrico (0,60 a 30  $\mu\text{m}$ ), levantou-se a curva espectral de emissão da lâmpada, incorporando a absorção das lâminas do porta-amostra vazio, de forma que o percentual de resposta do detector em função do comprimento de onda específica foi representado graficamente e que serviu para normalizar os resultados mensuráveis em procedimento análogo utilizando desta vez o fotoprotetor apropriado. Foram usados dois tipos de fotoprotetores com princípios ativos diferentes, e verificou-se a eficácia dos produtos em determinados intervalos do espectro solar, todavia notou-se que a espessura da película é fundamental para uma fotoproteção adequada. Estes resultados estão esboçados em gráficos de fácil visualização. Pretende-se utilizar a mesma metodologia para caracterização de óculos destinados a proteção contra o sol.

**MEDICION DE RUGOSIDAD DE MATERIALES DIELECTRICOS  
TRANSPARENTES.  
UNA NUEVA APLICACION DEL METODO DE CORRELACION DIGITAL DE  
SPECKLES.**

*F. Perez Quintián<sup>1</sup>, M. Rebollo<sup>1</sup>, N. Gaggioli<sup>2</sup> y M.R. Landau<sup>2</sup>*

1. Lab. Láser, Dpto. de Física, Fac. de Ingeniería, Universidad de Bs. As.,  
Pasco Colón 850, (1603) Buenos Aires, ARGENTINA
2. Grupo de Óptica y Láser, ENDE, CAC, Comisión Nacional de Energía Atómica,  
Av. del Libertador 8250, (1429) Buenos Aires, ARGENTINA

*Palavras-Chave:* speckle, correlación digital, rugosidad

El método de correlación angular de speckles, se utilizó con muy buenos resultados, para la medición de rugosidad de superficies reflectoras. A nuestro conocimiento, este método nunca fue utilizado para caracterizar superficies rugosas translúcidas como las de vidrios esmerilados. En este trabajo estudiamos la relación entre la rugosidad de una muestra y la correlación de intensidades de las figuras de speckle generadas por ella antes y después de rotarla un pequeño ángulo. Para ello utilizamos la teoría de Beckmann extendida al caso de transmisión. Comparamos los valores de rugosidad obtenidos por este método no destructivo con los que provee un rugosímetro mecánico de contacto, observando una muy buena coincidencia.

(CONICET y COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA, ARGENTINA)

**AUTOMATIZAÇÃO DE UM ELIPSOMETRO DE ZERO**

*Alvaro José Damião e Márcia A. Fogarin Destro*

Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP

*Palavras-Chave:* elipsometria, automação e índice de refração.

Elipsometria é uma técnica que permite o estudo das constantes ópticas e da espessura de um filme fino transparente, através da alteração do estado de polarização da luz refletida por este filme. É uma técnica bastante sensível às alterações na superfície estudada, como a deposição de algumas camadas atômicas de outro material ou adsorção de um gás, dentre outras.

Este trabalho descreve a automatização do processo de medida de um elipsometro de zero, comercial, operado manualmente, a fim de dispensar a intervenção do operador na execução da medida e de aumentar a precisão do instrumento. O elipsometro automatizado foi um Gaertner L-117, com mais de dez anos de uso. O sistema é controlado por um computador pessoal 8086 (clone IBM-XT), com co-processador aritmético. Para a conversão analógica-digital foi utilizada uma placa comercial de 12 bits. A menor divisão de leitura de azimute de polarizador/analizador era de 1/10 de grau e passou a 1/400 de grau. O intervalo entre as medidas ainda é muito longo devido a utilização do detector original, que é muito lento em uma aplicação tão precisa, levando em média 30 segundos para ter um sinal estabilizado. Para cada par de constantes elipsométricas são buscados mínimos por aproximações lineares e quadráticas, totalizando mais de 200 medidas com azimutes do polarizador e do analisador diferentes.

Serão apresentados: o fluxograma do software de aquisição de dados e a descrição do hardware de controle de motores de passo. Serão apresentados ainda os dados comparativos obtidos antes e depois da automação, bem como resultados de 50 medidas (72 horas) consecutivas em um filme de CaF<sub>2</sub> sobre Si.

## SPHERICAL AND CHROMATIC ABERRATIONS CONTROL IN AFOCAL OPTICAL SYSTEMS DESIGN

*Marcos de Castro Carvalho, Omar Barbosa Campos, Antonio Carlos Callado de Souza*  
Laboratório de Optrônica e Sensores/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Centro Tecnológico do Exército

*Palavras-chaves:* Afocal, laser, design

In this work we give the general methods for afocal optical systems design. These systems are used for a variety of purposes, since view finders to FLIR (forward-looking infrared) systems. These systems have been extensively employed in parallel-beam scanners, condensers systems and laser optics. Following the classical methodology, the individual curvatures of each element are determined in terms of the power and refraction index. Spherical aberration and coma can be reduced using the simplified methodology given by Klein, and also colour correction is given in Smith. An analogous analytical method was developed by the authors for specific application in infrared. Some typical systems are developed and listed below. The plots from MTF analysis are shown.

- A 5X (0,6328  $\mu\text{m}$  HeNe) beam expander laser;
- A negative-positive system greatly reduces spherical aberration and this results a more compact system (for the 5X HeNe expander);
- A Galilean-type of 50X magnification for 2 mm diameter input HeNe laser beam;
- An afocal power changer for use in microscopes. It is designed to rotate on a turret. A doublet is used with the usual microscope objective such that collimated light emerges;
- A simple view finder used in cameras and on certain types of photometers;
- Such a door viewer has a 150 deg view field.

The General Optics System Evaluation computer program (GENOPTICS-NASA) simply use a very far image for ray-trace evaluation and the results from MTF analysis allowing a perfect optical system.

## ESTABILIZAÇÃO DE FONTES EM METROLOGIA ÓPTICA

*Jane Cleide Goveia, Oswaldo Sanchez Júnior, Ismael Antônio Freire*  
Laboratório de Óptica, Divisão de Mecânica e Eletricidade, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A., IPT-SP

*Palavras-Chave:* padrões de irradiância, estabilização da alimentação de fontes, radiometria

Diversos tipos de fontes de luz são utilizados para caracterizar, aferir, calibrar ou rastrear instrumentos ou componentes ópticos na região visível do espectro eletromagnético. Em se tratando de metrologia óptica, é imprescindível a utilização de fontes de luz de comportamento estável, de forma que se possa obter reprodutibilidade dos dados, mantendo-se as mesmas condições ambientais. Carlsson e Clark (1975) estudaram a influência da variação da tensão de alimentação nos parâmetros dessas fontes, assim como Pulfrey (1976) estudou a sua estabilização óptica através da regulação da corrente. Para avaliar as principais variáveis que interferem na medição de grandezas fotométricas da fonte, realizamos experimentos com lâmpadas de descarga e de filamento, de acordo com procedimentos recomendados pelo NBS e NIST americanos. Procurou-se simular situações a que os laboratórios de metrologia estão sempre submetidos (variação da tensão de alimentação, surtos de tensão na linha, variação das condições ambientais, mudanças no arranjo experimental, tempo de vida, etc...). Os resultados são basicamente arquivos de dados e curvas que relacionam a resposta do sensor de um radiômetro (Optronic 730A) às condições ambientais e de alimentação da fonte, presentes no laboratório. De forma resumida, pode-se concluir:

- O tempo necessário para a fonte entrar em regime estável de troca térmica varia com a natureza da fonte, porém, mantida a alimentação estável, é possível afirmar que isso ocorre em cerca de 60 minutos.

- A irradiância das lâmpadas de descarga variam numa envoltória bem estabelecida. No entanto, é possível observar padrões de variação relacionados basicamente às características intrínsecas das fontes.

- Lâmpadas de filamento são mais sensíveis às variações de tensão e corrente de alimentação, mas apresentam melhor estabilidade quanto à irradiância.

## ANALISE ESPECTRAL DE SINAIS DE MICROONDAS COM ANALISADORES DO TIPO ACÚSTICO-ÓPTICO OPERANDO EM PARALELO

*Gefeson Mendes Pacheco, Eugênio Scalise JR.*  
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais-Divisão de Astrofísica

**Palavras Chave:** acústico-óptica, análise espectral, processamento de sinal

A interação acústico-óptica já deixou de ser um tema com interesse apenas acadêmico e, hoje em dia, existem diversos dispositivos comerciais tais como deflectores, moduladores e filtros ópticos sintonizáveis. Estes dispositivos permitem que sejam construídos sistemas tais como analisadores espectrais (em tempo real) para a espectroscopia de sinais de rádio ou ópticos, auto-correlacionadores para o processamento de sinais, interferômetros com aplicações no controle de fase de "arrays" de antenas e linhas de retardo para radar. Neste trabalho, apresenta-se o resultado do desenvolvimento de um novo sistema, para análise espectral de sinais de microondas, constituído de dois analisadores espectrais acústico-ópticos operando em paralelo. A utilização de espectrômetros acústico-ópticos apresenta algumas vantagens em relação a outras técnicas (banco de filtros, auto-correlacionador e FFT). O bom desempenho deste tipo de espectrômetro deve-se basicamente à faixa dinâmica (25-30dB), ao reduzido número de componentes, e à possibilidade de cobertura de banda instantânea que pode atingir várias centenas de megahertz. O sistema, em questão, é constituído basicamente de um laser de He-Ne, dois deflectores acústicos ópticos de Dióxido de Telúrio, duas lentes plano-convexas, espelhos e dois arranjos de foto-detectors do tipo CCD. As características técnicas finais correspondem a uma largura de banda instantânea de 100 MHz e uma resolução de 70 kHz. A utilização de dois sistemas em paralelo, com a mesma iluminação, requer o uso de técnicas especiais de calibração do espectrômetro assim como um controle maior de parâmetros tais como variação mecânica e de temperatura no local de instalação. As características finais do novo espectrômetro permitirão que sejam realizadas observações simultâneas de diversas transições da mesma molécula como no caso da molécula de amônia que apresenta transições separadas de dezenas de megahertz.

(CNPq)

## MEDIDAS DA VARIAÇÃO DO PARÂMETRO DE POSIÇÃO $\sigma_0$ DE FIBRAS ÓPTICAS

*Moacir Mendonça, Gilberto Mariano Camilo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás

**Palavras-Chave:** fibras, ópticas, parâmetro

As fibras ópticas são hoje em dia, um excelente meio de transmissão, por apresentarem propriedades de alto nível, tais como: baixa perda de energia, grande faixa de largura de bandas entre outras. Entretanto, o seu uso comercial, exige destas uma resistência mecânica elevada, pois em uso, elas são submetidas a uma tensão de tração por um longo tempo. Devido a isto a sua resistência mecânica inicial começa a diminuir levando à ruptura. Vários estudos neste sentido já foram realizados e comprovados. Para se descrever o comportamento da resistência mecânica das fibras ópticas, normalmente utiliza-se a "Função de Distribuição de Probabilidade de Weibull". Neste trabalho nós descrevemos o comportamento do parâmetro de posição  $\sigma_0$ , que é uma constante que depende do material na distribuição de Weibull. Faremos aqui um relato de observações feitas em experiências, onde constatamos que o parâmetro de posição, variou o seu valor inicial, quando amostras de fibras ópticas foram submetidas a um processo de fadiga estática por tração. As amostras de fibras foram tracionadas por um longo período de tempo, após o que foram retiradas e levadas a uma máquina de tracionamento dinâmico até o rompimento. De posse dos valores das tensões de ruptura e da função de Weibull linearizada traçamos as retas que forneceram os valores dos parâmetros de Weibull. Concluímos que o parâmetro de posição  $\sigma_0$ , sofreu uma variação sistemática para valores maiores, a medida que aumentou-se o processo de fadiga, tomando portanto, uma direção contrária a esperada. Tal fato, leva a supor que as fibras aumentam sua resistência num momento inicial, para depois começar a diminuir. Esse fenômeno está ligado à forma geométrica das trincas pré-existentes desde a fabricação das fibras, que de algum modo muda com a tensão no processo de fadiga.

## Medida da Distribuição de Temperatura usando Interferometria de Speckle Shearing

*Edson Rodrigues , Mikiya Muramatsu*  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* speckle shearing, interferometria, dupla-exposição.

A shearografia ; apresenta-se , hoje em dia, como uma importante alternativa entre os métodos de avaliação e inspeção por não contato. A técnica tem como princípio as propriedades da interferometria de *speckle*. Um feixe laser de argônio ( $\lambda=0,5143\mu\text{m}$ ), divergente, incide num difusor (vidro despolido), produzindo um padrão aleatório denominado de *speckle*. A luz espalhada forma a imagem numa câmera fotográfica, cuja lente objetiva foi coberta na metade de sua abertura por uma cunha de vidro de  $3^\circ$ . Foi feita uma dupla exposição fotográfica, uma com a vela acesa e a outra com ela apagada . A cunha faz com que cada ponto do objeto corresponda a dois pontos no plano imagem, ou seja, um único ponto do plano imagem corresponde a dois pontos muito próximos na superfície do objeto. Em cada exposição fotográfica, portanto, há uma interferência (superposição) da imagem com relação a ela mesma, sendo que o módulo desta superposição vai depender do *shear* introduzido pelo ângulo da cunha. Sendo assim, na dupla exposição temos duas imagens do objeto, cada uma, por sua vez, formada pela superposição dela com ela mesma. Desta maneira, ao invés de obtermos deslocamento de objeto, como na interferometria de *speckle*, a técnica obtém a sua primeira derivada. Após o registro fotográfico, duplamente exposto, é realizada uma filtragem de Fourier passa-alta. No shearograma filtrado temos a imagem do objeto com a presença de franjas sobrepostas, as quais representam o perfil de temperatura da chama. Este perfil é comparado com a temperatura obtida através de um termopar Cromel-Alumel. Os dados obtidos possuem boa concordância com experimentos apresentados na literatura.

## Full range continuous complex modulation spatial light modulator using two coupled-mode liquid crystal televisions

*Luiz Gonçalves Neto<sup>1</sup>, Danny Roberge<sup>2</sup> and Yunlong Shéng<sup>2</sup>*

(<sup>1</sup>) Laboratory of Integrated Systems, EPUSP, SP, e-mail:lgneto@lsi.usp.br; (<sup>2</sup>) Université Laval, Centre d'Optique, Photonique et Laser, Québec, Canada

**Key Words :** Complex amplitude modulation; Spatial light modulator; Fresnel hologram

Twisted nematic liquid crystal cells provide continuous phase and amplitude modulation. We explore this interesting property for implementation of a full range continuous complex amplitude modulation spatial light modulator (SLM). The continuous complex amplitude modulations is obtained with two cascaded twisted nematic liquid crystal televisions (LCTV's), both operating in phase and amplitude coupled modulation modes. A new simple method is introduced for on-situ measurement of the phase and amplitude modulations of each LCTV, that permits adjusting and optimizing the operating curve experimentally. The theory based on the Jones matrix calculus is used for characterization and optimization of the LCTV. The condition for full range complex modulation is that one of the LCTV's provides  $2\pi$  range phase modulation. A look-up table encoding method is proposed, that permits to compensate the phase/amplitude coupling and the non-linearity in the two individual LCTV modulations. Experimental techniques for determining the LCTV device parameters, for maximizing the phase-mostly modulation range and the amplitude-mostly modulation contrast and for testing the complex amplitude modulation are developed. Optical complex amplitude Fresnel holograms are shown.

(CNPq-Brazil; FACR-Québec; NSERC- Canada)

## DIFUSIÓN DE LUZ BLANCA POR UNA TRANSPARENCIA RUGOSA

*F. Perez Quintián<sup>1</sup>, M. Rebollo<sup>1</sup> y N. Gaggioli<sup>2</sup>*

1. Lab. Láser, Dpto. de Física, Fac. de Ingeniería, Universidad de Bs. As., Pasco Colón 850, (1603) Buenos Aires, ARGENTINA
2. Grupo de Óptica y Láser, ENDE, CAC, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. del Libertador 8250, (1429) Buenos Aires, ARGENTINA

*Palavras-Chave:* scattering, luz, blanca

Si se hace incidir luz sobre una superficie rugosa en forma perpendicular a ella, la distribución angular promedio de la intensidad transmitida es simétrica con respecto a la dirección del luz incidente y tiene un máximo en esa dirección. Sin embargo, a medida que el ángulo de incidencia aumenta, el máximo se corre hacia otra dirección que no es la dirección de incidencia ni tampoco la dirección dada por la ley de Snell. Este efecto anómalo ha recibido el nombre de "dispersión no refractiva". En este trabajo presentamos un sencillo modelo geométrico que explica una parte importante de este efecto y algunos resultados experimentales con luz blanca que confirman que el efecto tiene una componente geométrica. Se comparan los resultados teóricos y experimentales con los obtenidos para la difusión de luz coherente.

(CONICET y COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA, ARGENTINA)

## PROCESSAMENTO DE SINAIS HARMÔNICOS PARA CONTROLE DO REGISTRO HOLOGRÁFICO

*Aginaldo Freschi e Jaime Frejlich*  
Laboratório de Óptica, IF<sup>GW</sup>, UNICAMP

*Palavras-Chave:* controle de fase, interferometria, holografia

A qualidade do registro holográfico em um material fotossensível depende da estabilidade do padrão de interferência projetado sobre o material durante o registro. A diferença de fase entre o holograma e o padrão luminoso que o gera está diretamente relacionada à diferença de fase entre as ondas transmitida e difratada na saída do material. O controle de fase entre essas ondas, via realimentação negativa de um sinal de erro aplicado à montagem interferométrica, permite a estabilização do padrão luminoso com relação ao holograma. Nesse trabalho apresentamos um sistema de processamento de sinais para a medida e/ou controle de fase entre dois feixes ópticos que interferem. A soma coerente de duas ondas luminosas produz uma intensidade de luz que depende não-linearmente da diferença de fase entre elas. Introduzindo uma modulação senoidal de fase (de baixa amplitude) em um dos braços do interferômetro causamos, na intensidade de luz, o aparecimento de sinais harmônicos da frequência de modulação. Os termos de primeiro e segundo harmônicos estão em quadratura de fase e são processados eletronicamente para gerar um novo sinal de segundo harmônico, cuja demodulação com um amplificador lock-in fornece diretamente a medida da diferença de fase entre as ondas. O sinal demodulado pode ser usado como sinal de erro para o controle de fase entre as ondas em qualquer valor arbitrariamente escolhido. Aplicamos essa técnica de processamento em experimentos de holografia dinâmica com cristais fotorrefrativos do tipo  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ . Através do controle de fase forçamos a gravação de hologramas em condições "não-naturais" de registro, gerando assim hologramas que se movem - "fringe-locked running holograms". Mostramos que hologramas com maior eficiência de difração são gravados nessas condições.

(CAPES, CNPq / BRASIL)  
(VOLKSWAGEN-STIFTUNG / ALEMANHA)

## A LOW FREQUENCY TREATMENT OF THE ELECTROMAGNETIC SCATTERING BY MANY SMALL DIELECTRIC SPHERES

*Thierry J. Lemaire*

Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

*Palavras-chave:* electromagnetic scattering, spheres cluster

The study of electromagnetic scattering by many spheres is relevant in a wide range of topics. Examples are radiative transfer in atmospheres, interaction of electromagnetic radiations with interstellar and interplanetary particles, combustion diagnostic, ... Various methods have been developed to describe this kind of phenomenon. In particular those based on the expansion of the electromagnetic fields with the vectors spherical harmonics and where the multiple scattering is described by use of the T-matrix approach [1]. However, the amount of numerical calculus becomes rapidly prohibitive with the increase of the number of spheres and size parameter.

In this work, we describe a simple approximation which permits to solve the problem of electromagnetic scattering by an ensemble of small dielectric spheres ( $\text{Re}(m)ka < 1$ , where  $m$  is the complex refractive index and  $ka$  is the size parameter of a sphere), using the second order representation of the electric field, i.e., each sphere is described by an electric dipole, a magnetic one and an electric quadrupole. The corresponding polarizabilities are deduced from the Mie theory and the interaction between the spheres is taken into account by writing the multiple scattering expansion. This approximation leads to a flexible and easy to implement algorithm which permits to consider until some thousands of spherical scatterers. It must be noticed that this simple approximation does not involve time consuming evaluations of functions like the Bessel and the associated Legendre ones usually encountered in other models. Some numerical results are presented to illustrate the method.

[1]: Y.M. Wang and W.C. Chew, "A recursive T-matrix approach for the solution of electromagnetic scattering by many spheres", IEEE Trans. Ant. Prop. 41, p. 1633-1639 (1993).

(CNPq)

## DESENHO ÓPTICO DO INSTRUMENTO OFTÁLMICO: LÂMPADA DE FENDA

*Fátima M. M. Yasuoka, Antônio C. Romão, Jarbas C. de Castro Neto*  
Instituto de Física de São Carlos - USP - SP

*Palavras-Chave:* desenho, lâmpada, oftálmica

Este trabalho tem por objetivo desenvolver uma linha de pesquisa bastante interessante dentro da área de Instrumentação Óptica, a parte da Óptica Técnica denominada de Desenho Óptico integrada à área de Oftalmologia, cujo o intuito é desenvolver um instrumento oftálmico muito utilizado na área Oftálmica: a Lâmpada de Fenda. Com o desenvolvimento tecnológico nas diversas áreas da Ciência, o Desenho Óptico vem desenvolvendo um papel importante no projeto de sistemas ópticos cada vez mais sofisticados, conforme as mais variadas finalidades requeridas por específicos instrumentos em determinadas áreas tecnológicas. A principal função do Desenho Óptico é a produção de uma imagem otimizada através dos sistemas ópticos, para tal estudam-se as técnicas de desenho, análise e avaliação dos sistemas ópticos. O Desenho Óptico de um sistema fundamenta-se na aplicação de princípios físicos, matemáticos e de engenharia para a caracterização de uma imagem óptica otimizada formada pelos sistemas ópticos, para uma específica aplicação. A Lâmpada de Fenda é um instrumento óptico bastante utilizado pelos oftalmologistas para a realização de exames da visão. A aplicação mais importante deste aparelho é a observação da parte anterior do olho humano, inclusive a lente e o corpo cristalino próximo. A Lâmpada de Fenda é uma combinação perfeitamente funcional do dispositivo de iluminação e do estereo-microscópio, interligando ambos por meio de um eficiente sistema mecânico. Este sistema mecânico serve de base de fixação do paciente, além de permitir o controle total de orientação, alinhamento e ajuste do sistema como um todo ao usuário. O desenho óptico e mecânico do protótipo da Lâmpada de Fenda foi projetada cuidadosamente com o intuito de melhorar: a qualidade de imagem, a confortabilidade do paciente e do usuário, a facilidade de manuseio ao usuário, a facilidade de produção, a disponibilidade dos componentes ópticos e mecânicos no mercado nacional e o baixo custo de produção. O objetivo principal deste trabalho é realizar um projeto utilizando tecnologia totalmente nacional, barateando o custo e mantendo uma ótima qualidade requerida pela Lâmpada de Fenda, que é um dos instrumentos imprescindíveis numa consulta oftálmica.

## COMPONENTES DIFRATIVOS DE POLARIZAÇÃO PRODUZIDOS HOLOGRAFICAMENTE

*Carlos R. A. Lima e Lucila Cescato*  
Laboratório de Óptica - IFGW - Unicamp

*Palavras Chave:* difração, polarização, holografia

Estruturas periódicas com períodos menores que o comprimento de onda incidente têm interessantes propriedades de polarização e podem substituir com vantagens componentes ópticos convencionais, tais como polarizadores, lâminas de onda e divisores de polarização. O projeto destes componentes é fundamentado nos resultados de Teorias Vetoriais de Difração e sua confecção é baseada no uso de técnicas holográficas.

Cada componente entretanto exige o emprego de processos particulares. Neste trabalho é descrita a fabricação de um polarizador de grade que analogamente aos polarizadores utilizados na região de microondas, opera numa larga faixa da região do visível e infra-vermelho próximo. Este componente consiste basicamente num arranjo periódico de fitas metálicas cujo espaçamento é cerca de 3 vezes menor que o comprimento de onda para o qual ele será utilizado. Por este motivo quanto menor o comprimento de onda de interesse, maior será a dificuldade na sua confecção.

A primeira técnica utilizada para confecção do polarizador consistiu na evaporação de um filme de Alumínio sobre um substrato transparente (vidro ou quartzo), deposição de um filme fino de fotorresina sobre o filme metálico, gravação de uma rede holográfica, com o período pré-determinado, até a exposição de janelas do filme de metal e posterior ataque por plasma reativo do alumínio.

Um segundo processo foi também realizado, consistindo na deposição de um filme espesso de fotorresina sobre um substrato transparente, gravação de uma rede holográfica profunda, com o período pré-determinado e evaporação oblíqua de Alumínio sobre a rede de forma a cobrir apenas as cristas da estrutura em relevo.

Os resultados da análise dos componentes produzidos por ambas as técnicas, mostraram que a segunda técnica é mais interessante tanto do ponto de vista fabricação quanto de eficiência dos componentes.

(FINEP e CNPq)

## DETERMINAÇÃO DE ÍNDICES DE REFRAÇÃO POR REFRACTIONOMETRIA DE PRISMA COM REDUÇÃO FOTOMÉTRICA DO ERRO DO DESVIO MÍNIMO

*Jane Cleide Goveia, Oswaldo Luiz Bueno Martins, Raul Leone Filho*  
Laboratório de Óptica, Divisão de Mecânica e Eletricidade, Instituto de Pesquisas  
Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A., IPT-SP

*Palavras-Chave:* refratometria de prisma, redução de erros, índice de refração

A refratometria de prisma constitui-se numa técnica de alta precisão na determinação de índices de refração de sólidos e líquidos com precisão em torno da sexta ou sétima casa decimal. Entretanto, inúmeros cuidados experimentais são exigidos para tal. Tilton (1) e Werner (2) estudaram em detalhe as exigências goniométricas (ângulo de incidência, ângulo refrator, etc) e mesmo ambientais (pressão, temperatura, humidade, presença de CO<sub>2</sub> e vapor de água no ar) para minimização de erros. Atendidas as condições construtivas ideais e as condições ambientais, permanece o erro devido à orientação do prisma na posição do desvio mínimo. Segundo Werner (2), o erro no posicionamento produz erros positivos, de modo que não é possível compensá-los realizando várias medidas.

Na técnica utilizada, substituímos a observação visual do desvio mínimo por um detetor. À medida que a raia espectral percorre a superfície do detetor, a irradiância varia conforme o ângulo sólido e a área pela qual o detetor recebe o sinal. Assim, na inflexão, a raia projeta-se sobre o extremo do detetor, situação em que o sinal é mínimo. Para aumentar o gradiente da irradiância entre o centro do detetor e seu extremo estudamos o comportamento do sinal para detetores posicionados obliquamente.

Com essa técnica, diminuímos bastante a imprecisão inerente ao método do desvio mínimo associada à orientação do prisma na posição de desvio mínimo.

(1) Tilton, L.W., J. Res. Nat. Bur. Stand., 2, 909 (1929),

(2) Werner, A. J., Applied Optics, 7, 837 (1968)

## SISTEMA DE AQUISIÇÃO DE DADOS PARA DETETORES BIDIMENSIONAS

*Guilherme B. Fraguas<sup>(1)</sup> Rafael Lorandi de Oliveira<sup>(1,2)</sup>  
A. Rubens B. de Castro<sup>(1,3)</sup>*

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron  
Caixa Postal 6192, 13083-970 Campinas, SP

<sup>(2)</sup>Faculdade de Engenharia Elétrica - UNICAMP, Campinas, SP

<sup>(3)</sup>IFGW - UNICAMP, Campinas, SP

*Palavras-chave:* imagens, espectroscopia, instrumentação

Este trabalho trata do desenvolvimento de uma interface de digitalização de imagens adquiridas por detetores bidimensionais de fótons sensíveis à posição. Esta interface é um sistema dedicado de aquisição controlado por computador, possuindo processamento próprio e memória temporária para o armazenamento da imagem, cuja transferência é feita por DMA. A interface é comandada através de uma das portas de E/S do computador. O protótipo do hardware do sistema está montado em placa padrão para slot de PC-AT, utilizando-se a técnica de wire-wrap. Foi também desenvolvido o software específico para o sistema, manipulando e armazenando os dados adquiridos pelo hardware, trabalhando no sistema operacional MS-DOS com resolução gráfica de 640x480x256 cores (linguagem Turbo Pascal 7.0). A interface recebe do detetor, para a aquisição da imagem em duas dimensões, dois sinais analógicos proporcionais à posição do evento em duas dimensões, e um sinal de sincronismo digital que indica a validade dos sinais de posição, realizando um histograma bidimensional em tempo real. O software permite aquisição bidimensional e unidimensional, utilizando-se independentemente dos dois canais de entradas analógicas. Na versão atual, utilizou-se resolução de 256 posições por canal (8 bits de resolução da conversão analógica-digital) com profundidade de contagem de 65536 (16 bits) para cada célula de contagem. Consegui-se taxa de contagem de pico próxima a 50kHz, limitada pela velocidade do microcontrolador da placa (8752, da Intel, a ser substituído brevemente por um equivalente mais rápido), confirmando a utilidade do sistema.

## CABEÇOTE TÉRMICO DE MEDIÇÃO DE POTÊNCIA LASER ( ST )

*Raúl Hernández Tabares, Juan Gualberto Darias, Diego Frias, Raúl Almeida Nunes*  
PUC-Rio / CEADEN / IPRJ-UERJ

*Palavras-Chave:* termopilhas, modelagem, térmico

Este trabalho apresenta todo o processo de conformação, cálculo matemático, desenho e calibração de dois cabeçotes térmicos de medição de potência de radiação laser na faixa espectral do ultravioleta até infravermelho distante e potências de 10mW até 100W.

Como elemento sensor da radiação laser foi desenvolvida uma termopilha com filmes finos de Bismuto e Antimônio. O padrão geométrico da termopilha foi projetado com base no gradiente de temperatura provocado pelo fluxo térmico de energia incidente.

Foi desenvolvido um programa de modelagem numérica, por elementos finitos, para determinar a distribuição térmica no volume do cabeçote. Os resultados numéricos desta distribuição são ajustados de acordo com valores obtidos experimentalmente. Os parâmetros geométricos otimizados da termopilha, da cabeça sensora e do corpo dissipador térmico e bem como o limite de potência e de densidade de potência incidente no cabeçote térmico foram determinados com esta modelagem. A partir dos dados obtidos em procedimentos experimentais foi realizada uma avaliação da modelagem numérica. São apresentadas as soluções mecânicas de conformação da termopilha, a cabeça sensora e o dissipador térmico. Projetou-se um pre-amplificador para ser incorporado à cabeça sensora de forma garantir uma calibração do cabeçote independente da eletrônica externa utilizada na medição. Este pre-amplificador garante um ajuste de zero do sinal medido e uma melhor relação sinal-ruído.

A calibração do cabeçote térmico envolveu a realização de diversos procedimentos experimentais de forma a determinar a faixa de linearidade, a dependência do valor de potência medido com a densidade de potência incidente e com o posicionamento do feixe no sensor, a caracterização da estabilidade térmica do sistema, seu tempo de resposta, sua detectividade ( $D^*$ ) e ruído equivalente de potência (NEP).

( FAPERJ, UERJ, CAPES )

## CONFEÇÃO DE REDES DE DIFRAÇÃO HOLOGRÁFICAS PARA ENSINO

VALDIR C. COLUSSI\*

FCM/UNICAMP. Cx. Postal 6173, CEP 13083-970 Campinas - SP.

ADRIANO M. CANSIAN

IBILCE/DCCE - UNESP. R. Cristóvão Colombo, 2265 CEP 15055-000 S.J.Rio Preto - SP.

*Palavras-Chave:* rede, difração, holografia

Neste trabalho mostramos que, a partir de conceitos básicos de óptica, é possível confeccionar redes de difração holográficas que podem substituir, sem perda de qualidade, as redes comerciais utilizadas nos laboratórios de ensino de física. São discutidas técnicas de confecção, revelação e caracterização.

A densidade de linhas em uma rede de difração holográfica é definido em função do ângulo entre os dois feixes incidentes ( $N=1/\lambda \cdot \sin\theta$ ), no momento de sua confecção. No experimento foi utilizado um sistema óptico simples, constituído por um laser de HeNe ( $P \approx 5mW$ ), um expansor de Gauss e espelhos. Dois feixes de mesma intensidade sofrem interferência sobre uma placa holográfica. Foram produzidas e caracterizadas redes entre 350 e 1300 linhas/mm como mostrados na tabela. O sistema proporciona um experimento para produção de redes de difração de baixo custo e de excelente qualidade.

Rede	Confecção		Caracterização	
	$\theta \pm \Delta\theta$ (°)	$N \pm \Delta N$ (/mm) (Esperado)	$\theta \pm \Delta\theta$ (°)	$N \pm \Delta N$ (/mm) (Experimental)
1	$12,60 \pm 0,01$	$344 \pm 15$	$11,60 \pm 0,02$	$318 \pm 31$
2	$14,60 \pm 0,01$	$398 \pm 15$	$14,00 \pm 0,02$	$383 \pm 31$
3	$17,30 \pm 0,01$	$470 \pm 15$	$17,20 \pm 0,02$	$466 \pm 31$
4	$21,30 \pm 0,01$	$574 \pm 14$	$21,60 \pm 0,02$	$581 \pm 30$
5	$48,20 \pm 0,01$	$1178 \pm 11$	$56,30 \pm 0,02$	$1315 \pm 18$
Comercial		570 (nominal)	$20,02 \pm 0,02$	$546 \pm 29$

(\*Bolsista FAPESP)

## FONTE DE ALTA TENSÃO COM RESPOSTA RÁPIDA: APLICAÇÃO À SINTONIZAÇÃO E ESTABILIZAÇÃO DE LASERS DE CO<sub>2</sub>

Ronaldo Celso Viscovini, Edjar Martins Telles, Artemio Scalabrin, Daniel Pereira  
Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP - 13.083-970, Campinas, SP, Brasil

*Palavras-Chaves:* alta tensão, laser, piezoelétrico.

Neste trabalho apresentamos o desenvolvimento e construção de uma fonte de alta tensão regulável até 1300V, com corrente de até 10mA e tempo de resposta da ordem de milisegundos. Este circuito permite amplificar sinais de geradores de funções para níveis de tensão necessários no controle de diversos dispositivos na área de lasers e espectroscopia.

Normalmente existe uma preferência por configurações de fontes com regulagem de tensão em série, que apresentam melhor rendimento eletrônico. Entretanto estas apresentam limitações quanto ao tempo de resposta, daí optarmos pela construção de uma fonte com regulagem em paralelo, que é costumeiramente mais rápida. Esta fonte é baseado na divisão resistiva de tensão, com o circuito utilizando um transistor substituindo o resistor convencionalmente associada em paralelo com a saída. Um amplificador operacional (LM723) controla o nível de condução deste transistor, conforme a relação entre a tensão de controle e a de saída. Esta configuração apresenta ainda a vantagem da proteção contra sobre-carga e curto-circuito.

Inúmeras podem ser as aplicações dessa fonte. No nosso caso, ela serve para alimentar cerâmicas piezoelétricas (PZT) empregadas para sintonizar o comprimento de cavidades de lasers de CO<sub>2</sub> guia de ondas, variando assim suas frequências em até 300MHz. A alta velocidade de varredura, de até 50ms, permite-nos monitoramento em tempo real da curva de ganho destes lasers nos seus intervalos de frequências num osciloscópio comum. Isto elimina a necessidade de registradores XY, osciloscópios com retenção digital ou equipamentos ligados a computador, inerentes às varreduras lentas. A rápida resposta desta fonte possibilita-nos ainda estabilizar estes lasers travando-os à frequências de interesse. Apesar de sua sofisticação este projeto apresenta um baixo custo, utilizando-se de componentes disponíveis no mercado nacional.

(CNPq, FAPESP)

## ESTABILIZAÇÃO HOLOGRÁFICA APLICADA AO ESTUDO DE CRISTAIS FOTORREFRATIVOS DE $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$

*P. M. Garcia e J. Frejlich*

Laboratório de Óptica - IFGW - UNICAMP

*J. F. Carvalho, A. C. Hernandez, N. J. H. Gallo, e J. P. Andreeta*

Laboratório de Crescimento de Cristais - IFSC - USP

**Palavras-Chave:** holografia, cristais fotorrefrativos, mistura de ondas

Alguns parâmetros característicos dos cristais fotorrefrativos, tais como a densidade de centros doadores sensíveis ao comprimento de onda da luz utilizada, a eficiência quântica do processo de excitação dos portadores e o seu comprimento de difusão, têm papéis determinantes nas aplicações destes cristais. Alguns destes parâmetros estão associados ao tipo e à concentração de dopantes (ou de defeitos da rede cristalina) presentes na amostra e determinam a máxima eficiência de difração possível de se obter em um holograma registrado no material, visto que esta depende da amplitude de modulação do campo elétrico interno gerado pela redistribuição das cargas, e portanto, da própria amplitude de modulação da densidade de cargas. Por outro lado, as condições ótimas para o seu uso como meio para holografia dinâmica depende do comprimento de difusão das cargas fotogeradas, uma vez que este determina a frequência espacial associada à maior velocidade de resposta do material. Neste trabalho analisamos duas amostras fornecidas pelo Grupo de Crescimento de Cristais do IFSC - USP que foram obtidas do mesmo "boule" de  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  (BTO-11). A primeira foi estudada com um laser de  $\text{HeNe}$  ( $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ ), e a segunda com um laser de  $\text{Ar}^+$  ( $\lambda = 514.5 \text{ nm}$ ). Neste estudo demonstramos a aplicação de métodos holográficos, com aprimoramentos recentes, que possibilitaram, primeiramente, a medida da diferença de fase entre a rede de difração holográfica gerada e o padrão de luz incidente, e também a avaliação da velocidade de deslocamento da rede em função de um campo elétrico externo aplicado. Realizamos também medidas complementares, neste caso sem a aplicação de campo elétrico externo, do ganho de energia e da sensibilidade holográficas em função da frequência espacial da rede para avaliar respectivamente a densidade de centros envolvidos e o comprimento de difusão dos fotoportadores. Os valores obtidos se mostram coerentes entre si, o que demonstra a validade dos métodos empregados, e os comparamos com os dados da literatura, obtidos através de outras técnicas.

(CNPq)

## TÉCNICAS DIGITALES DE SPECKLE PARA EL ANALISIS DE MOVIMIENTOS Y DEFORMACIONES DE SUPERFICIES

*E.N. Hogert, M.R. Landau, M.A. Rehollo y N.G. Gaggioli*

Grupo de Óptica y Láser, Dpto. ENDE, CAC, Comisión Nacional de Energía Atómica,  
Av. del Libertador 8250, 1429 Buenos Aires, ARGENTINA

**Palavras-Chave:** speckle, metrologia

Si presentan, en este trabajo, dos métodos simples para medir movimientos compuestos y deformaciones de una transparencia rugosa, utilizando un procesamiento digital de speckles. La ventaja de estos métodos frente a las técnicas de speckles conocidas, es que no se necesita realizar ninguna transformada de Fourier. En el primer método se utiliza una cámara CCD para registrar dos patrones de speckles, proyectados sobre una pantalla, obtenidos antes y después del movimiento o deformación de la superficie. Usando un procesamiento digital de imágenes, se obtienen los parámetros que determinan la evolución de la superficie. Para el segundo método, se construye un filtro con el negativo de la fotografía del speckle obtenido antes del movimiento o deformación del difusor. Una cámara CCD registra la intensidad difundida por la superficie y transmitida por el filtro, sobre una pantalla graduada. Nuevamente, mediante un procesamiento digital de speckle, pero en tiempo real, se analiza la evolución de la transparencia rugosa.

(CONICET - COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA, ARGENTINA)

## FILTROS INTERFERENCIAIS PARA REGIÃO DO VISÍVEL

*Diva Glasser Leme e Solange Eiko Mitani*

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

*Palavras-Chave:* filtros, interferenciais, fabry-perot

Filtros interferenciais Fabry Perot são coatings de múltiplas camadas dielétricas ou metálicas, nos quais o espectro de transmissão se caracteriza por transmitir em uma faixa estreita de frequência. Esses coatings de múltiplas camadas dielétricas são depositados utilizando-se um sistema de alto vácuo, com controle da espessura e taxa de evaporação. Outro método alternativo, para preparação desses filtros, consiste na deposição em alto vácuo de duas camadas refletoras metálicas com um espaçador dielétrico sendo conhecido como filtro metal/dielétrico/metal. Filtros M/D/M são atrativos pela sua simplicidade e baixo custo de fabricação, mas não é adequado para um grande número de aplicações, devido a absorção destas camadas metálicas. Foi desenvolvido um programa de computação para determinar a refletividade, a transmissão e a absorção destes coatings. Os cálculos auxiliaram na escolha dos materiais e espessura dos filmes a serem depositados nos substratos de vidro. Foram preparados filtros interferenciais para região do visível, para os dois tipos de configurações, sendo utilizados o ZnS,  $MgF_2+5\%BaF_2$  e a prata. Foram comparados os procedimentos experimentais para confecção dos filtros, pois dependendo da largura de banda, refletividade e absorção, podem ser depositadas camadas de materiais dielétricos, e em alguns casos, pode-se obter um resultado similar utilizando-se a configuração M/D/M. Esses filtros são principalmente utilizados em sistemas espectrométricos.

## EFEITOS DA RADIAÇÃO LASER DE HELIO-NEONIO S- E P- POLARIZADA NA REGENERAÇÃO DE LESÕES CRIADAS ARTIFICIALMENTE NA PELE DE RATOS

M. S. Ribeiro\*, D. M. Zezell\* e T. Zorn\*\*

\* Supervisão de Materiais Optoeletrônicos, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Caixa Postal 11042, Pinheiros, 05422-970, São Paulo, Brasil

\*\* Departamento de Histologia e Embriologia, Instituto de Ciências Biomédicas I, Universidade de São Paulo, 05508-900, São Paulo, Brasil

*Palavras-Chave:* laser de He-Ne, luz linearmente polarizada, cicatrização de lesões

De acordo com a teoria das propriedades ópticas de superfícies, utilizando as equações de Maxwell macroscópicas, a eficiência na deposição inhomogênea de energia que ocorre numa interface microscopicamente rugosa, como é a membrana celular, irradiada com luz laser, vai depender do tipo de polarização do campo elétrico. Considerando um feixe linearmente polarizado, esta eficiência na deposição de energia, depende dos parâmetros da rugosidade para o caso de luz p-polarizada e independe de tais parâmetros, para luz s-polarizada. Por esta razão, foi realizado um estudo piloto utilizando-se ratos, onde queimaduras com nitrogênio líquido foram criadas no dorso do animal. Foram feitas três lesões ( $\Phi = 6\text{mm}$ ), onde na primeira incidiu-se luz p-polarizada ( $\lambda = 632.8\text{ nm}$ ,  $D = 1\text{ J/cm}^2$ ,  $t_{\text{exp}} = 3\text{ min.}$ ), na segunda lesão, luz s-polarizada e a terceira foi deixada para controle. Foram feitas quatro irradiações num período de duas semanas e cortes histológicos da pele do animal foram obtidos após cada irradiação com o objetivo de se determinar o efeito da luz laser polarizada na cicatrização de feridas criadas artificialmente em ratos, através da variação da concentração de fibras colágenas e fibroblastos. Os resultados indicam um aumento da velocidade cicatricial para o caso de luz p-polarizada.

(Apoio CNPq)

## TERAPIA FOTODINÂMICA EM AMBIENTE HIPERBÁRICO: MORTE CELULAR PROGRAMADA EM TUMOR EXPERIMENTAL

V.C. Colussi\*, P.E. Iazetti, D.F. Cabral, C. Hackel, E.M.D. Nicola, K. Metz\*\*

\*Bolsista FAPESP, \*\*Pesquisador CNPq, Fac. Ciências Médicas, Núcleo de Med. Experimental.

J.H. Nicola

Instituto de Física "Gleb Wataghin".

UNICAMP, Cx. Postal 6173 - 13083-970 Campinas-SP

*Palavras-chave:* Terapia Fotodinâmica, hematoporfirina, tumor, Oxigenoterapia hiperbárica.

Um dos fatores procurados em terapias anticâncer é a seletividade. Nos últimos anos a *terapia fotodinâmica (PDT)*, tem se mostrado forte aliada, podendo ser administrada em conjunto com tratamentos convencionais. A PDT consiste na injeção intravenosa de um fotosensibilizador, retido por várias horas em células malignas. Durante este período, o tecido é irradiado com laser, e através de mecanismo de transferência de energia não radiativa, agentes fototóxicos anticâncer são produzidos (oxigênio singlete). O fornecimento de oxigênio molecular em *condições hiperbáricas (OHB)* permite que o tecido tumoral atinja altos níveis de oxigenação, potencializando a produção destes agentes citotóxicos. Neste trabalho projetamos, construímos e testamos um sistema experimental que avalia este efeito.

Ratas Wistar de 8 semanas foram inoculadas com células de um tumor experimental (*Walker 256*) no tecido subcutâneo dorsal em 4 sítios distintos ( $10 \times 10^6$  células/sítio). *Hematoporfirina Ester (HpE)* foi administrado ( $C=10\text{mg/Kg}$ ), 24 horas antes do tratamento. O animal foi anestesiado, colocado na câmara hiperbárica e pressurizado à 3 ATA e oxigênio 100%. O tumor foi fotosensibilizado durante 45 minutos com um *laser de HeNe* ( $\lambda=632,8\text{nm}$ ;  $P=10\text{mW}$ ). Após 24 horas do tratamento este tumor foi submetido a *exame histológico e fragmentação de DNA por eletroforese em gel de agarose*.

O *exame histológico* demonstrou uma intensa redução de células tumorais na área irradiada quando comparadas com regiões não irradiadas. Este efeito não foi encontrado em animais sem pressurização hiperbárica. Encontramos, na região irradiada, células tumorais em *processo de "morte programada" (Apoptose)* e com *indícios de Necrose*. A *eletroforese* desta região revelou DNA fragmentado em múltiplos de 180-190 pares de bases (*tamanho oligonucleossômico*), característicos deste tipo de morte celular.

O sistema experimental demonstrou ser muito apropriado para o estudo de múltiplos fatores físicos e biológicos envolvidos na PDT, bem como a eficácia terapêutica. Estudos com lasers de alta potência, uso de diferentes pressões visando curva dose-resposta, e novos fotosensibilizadores estão sendo providenciados, no objetivo de criar condições para tentativas de cura de tumores humanos. (APOIO: FAPESP, CNPq).

## ANÁLISE HISTOPATOLÓGICA DE ARTÉRIAS PARA CORRELAÇÃO COM A TÉCNICA DE ESPECTROSCOPIA RAMAN

\*C. A. Pasqualucci, \*M. C. Chavantes, S. Sathaiah, L. Silveira Jr., R. A. Zângaro, M. T. T. Pacheco

\*Departamento de Patologia da FMUSP, \*Instituto do Coração do HCFMUSP  
CEPEDEX/UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba, S.J. Campos - SP  
E-mail: lope@univap.br

*Palavras-Chave: espectroscopia Raman, artérias, análise histopatológica*

Com o objetivo de verificar a composição de material biológico e correlacionar com a análise feita através de espectroscopia Raman na mesma amostra, foi realizado estudo histopatológico em fragmentos de artérias aorta e coronária humanas com e sem comprometimento aterosclerótico. O material foi obtido através de autópsia de pessoas falecidas de morte natural e colocado imediatamente em nitrogênio líquido (-196 °C) para preservação, evitando interferir com a análise através de espectroscopia Raman que uma fixação química poderia provocar. A análise espectroscópica foi feita sobre a camada íntima da artéria em temperatura ambiente. Em seguida, o material foi colocado em formalina a 10% para manter a preservação e então recortadas em fragmentos de 5mm de espessura para ser processado seguindo as técnicas tradicionais: desidratação (álcool), diafanização (xilol), embocado em parafina para corte de 5 µm de espessura, através de micrótomo. Os cortes foram corados com o método de Verhoeff para fibras elásticas, método de Picrossirius e do tricrômico de Masson para fibras colágenas, Sudan IV para gordura e hematoxilina e eosina para os aspectos gerais da estrutura, incluindo depósito de cálcio (quando presente há necessidade de descalcificação prévia do tecido). Os resultados observados tanto com o estudo através de espectroscopia Raman como através de análise histopatológica indicam que os diversos aspectos metodológicos adotados foram suficientes e adequados para permitir a correlação dessas duas formas de análise da constituição.

## NEAR INFRARED RAMAN SPECTROSCOPY OF CORONARY ATHEROSCLEROTIC LESIONS

S. Sathaiah, F. Moral, C. A. Pasqualucci\*, R. A. Zângaro,  
M. C. Chavantes\*, M. Tadeu T. Pacheco

\*Departamento de Patologia da FMUSP, \*Instituto do Coração do HCFMUSP  
CEPEDEX/UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba, S.J. Campos - SP  
E-mail: lope@univap.br

*Key Words : Raman spectroscopy, human coronary artery, atherosclerotic diagnosis*

Near infrared (NIR) Raman spectral diagnosis of coronary atherosclerotic lesions would be very useful for the guidance of fiber-optic catheter in laser angi- surgery systems. Here we report, Raman spectral characterization of human coronary artery tissues. Raman spectrum (RS) of normal intima exhibited bands assignable to structural proteins collagen and elastin. Observed predominant bands at 1660, 1452 and 1260  $\text{cm}^{-1}$  are due to amide I, C-H bending and amide III vibrations of structural proteins, respectively. RS of atheromatous plaque exhibited a three fold increase in spectral intensity compared to the RS of normal artery. The most significant changes are the C - H bending mode shifts to lower frequency and appears as an intense band at 1441  $\text{cm}^{-1}$  which can be attributed to the accumulated lipids in the necrotic core. Further, the band at 1670  $\text{cm}^{-1}$  with a bandwidth around 40  $\text{cm}^{-1}$  in contrast to the broader (bandwidth 60  $\text{cm}^{-1}$ ) amide I band at 1661  $\text{cm}^{-1}$  gave a clear evidence that the accumulated lipids are mainly due to cholesterol. Another type of atheromatous plaque in which an anomalous (eight fold) increase in the relative spectral intensity compared to RS of normal artery has been observed. The major bands at 1442, 1665, 1301, 1265, 700  $\text{cm}^{-1}$  and several other features between 600 to 1200  $\text{cm}^{-1}$  are assignable to cholesterol and cholesterol esters. RS of calcified plaques exhibited intense bands at 962 and 1073  $\text{cm}^{-1}$  which are due to phosphate and carbonate symmetric stretching vibrations of accumulated calcium hydroxyapatite and carbonate apatites. (FINEP)

## ESPECTROSCOPIA DE FLUORESCÊNCIA DE MULTI-EXCITAÇÃO PARA IDENTIFICAÇÃO DE ADENOMA COLÔNICO *IN VIVO*

L. Silveira. Junior, R. A. Zângaro, M. Tadeu. T. Pacheco, J. Van Dam#, G. Zonios\*, I. Itzkan\*, R. Manoharan\*, Irving Itzkan\*, Michael Feld\*

CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

#Endoscopy Center, Brigham and Women Hospital, Boston, MA, USA

\*G. R. H. Spectroscopy Laboratory, Massachusetts Institute of Technology  
Cambridge, MA, USA

*Palavras-Chave: fluorescência, diagnóstico "in vivo", colonoscopia*

A espectroscopia de fluorescência vem sendo usada como técnica de identificação de tecidos em procedimentos de colonoscopia. Esta técnica é capaz de diferenciar tecidos normais e lesões pré-malignas. Apresenta-se aqui resultados da espectroscopia de fluorescência obtidos com um espectrofluorímetro multi-excitação rápido, onde os mapas de EEM são obtidos a partir de experimentos "in vivo". Mapas de EEM podem fornecer importantes informações a respeito dos fluoróforos presentes nos tecidos, uma vez que cada fluoróforo tem um perfil de fluorescência único. Os procedimentos clínicos foram realizados no Hospital Brigham and Women (Boston, MA, USA) com pacientes submetidos a endoscopia de rotina para verificação de distúrbios gastrointestinais. Espectros de fluorescência e reflectância foram obtidos de adenomas e regiões normais vizinhas. Os adenomas foram removidos e analisados patologicamente. Dados de 5 pacientes com adenomas foram analisados para comparação espectral e histológica. Os resultados preliminares mostram que, os adenomas tem absorção duas vezes maior que a mucosa normal e os pólipos apresentam aumento da fluorescência na região do vermelho (600-690 nm) quando comparado com regiões normais, isto pode ser atribuído ao acúmulo da protoporfirina IX em regiões displásticas.

(UNIVAP)

## TERAPIA FOTODINÂMICA UTILIZANDO EXPOSIÇÃO PROLONGADA E ALA INDUZINDO PROTOPORPHYRIN IX

S. Furuzawa\*, Maria A. G. Cardoso\*, Marcos T. T. Pacheco\*, Steven L. Jacques\*\*

\*CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

\*\*Laser Biology Laboratory - M. D. Anderson Cancer Center  
University of Texas - USA

*Palavras-chave: 5-ALA, PP IX, terapia fotodinâmica*

A terapia fotodinâmica (PDT) é um tipo de quimioterapia foto-ativada com ênfase especial no tratamento do câncer. Para efetivar a PDT são necessários as combinações entre o fotossensibilizador (porfirina) e o oxigênio. O ácido aminolevulínico (5-ALA) quando administrado resulta na síntese metabólica da protoporfirina IX (PPIX) que é um fotossensibilizador natural. Neste trabalho utilizamos as células MTF-7 (adenocarcinoma de rato clonado a partir do 7,12-dimetilbenza-anthracene), as quais receberam 5-ALA (200 µg/ml) obedecendo a dois protocolos. No primeiro caso foi pré-distribuir o 5-ALA para que as células tenham o maior nível de PPIX e então irradiar com laser (630 nm, 100 mJ/cm<sup>2</sup>) até que todo o PPIX passe pelo processo de *photobleaching*, neste caso o 5-ALA foi administrado 24h antes da irradiação que tem um tempo de aplicação médio de 1 hora. No segundo caso, a irradiação laser foi feita ao mesmo tempo da administração do 5-ALA, provocando a morte celular assim que o PPIX fosse sintetizado. O resultado obtido nas culturas de células mostra que o protocolo dois evita internamento do paciente e permite que o sistema reponha o oxigênio utilizado, isto é, a PDT será mais eficiente.

## ENERGIA DE TROCA EM MOLÉCULAS DIATÔMICAS ALCALINAS: EFEITO DE PERÍODO

*Carlos E. Fellows<sup>1,2</sup>, Ricardo F. Gutterres<sup>1</sup>,  
Pedro S. Rocha<sup>1</sup>, Carlos E. Leal<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup>Laboratório de Espectroscopia, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

<sup>2</sup>Depto. de Eletrônica Quântica, Instituto de Física,  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro - RJ

<sup>3</sup>Instituto de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, São José dos Campos, SP

*Palavras-Chave:* Moléculas diatômicas, Moléculas alcalinas, Limite de dissociação.

A energia de troca das curvas de potencial dos estados eletrônicos fundamentais, na região próxima dissociação, é analisado neste trabalho para moléculas diatômicas alcalinas homo e heteronucleares. Esta análise é realizada utilizando-se a forma funcional  $Ae^{-ar}$ , onde  $A$  e  $a$  são parâmetros ajustáveis, para representar o termo de troca. Pudemos observar um efeito de período ao longo da série dos alcalinos para o parâmetro  $A$ , assim como um comportamento de saturação para o parâmetro  $a$ . Os resultados obtidos mostram que os parâmetros  $A$  e  $a$  possuem uma forte dependência da massa reduzida. Para o parâmetro  $A$  esta dependência é linear, enquanto que a variação de  $a$  em função da massa reduzida apresenta-se na forma de um comportamento de saturação a medida que o valor da massa reduzida aumenta. Estes comportamentos podem ser atribuídos ao aumento das camadas eletrônicas dos átomos envolvidos na formação das moléculas e um modelo fenomenológico é proposto para explicação destes comportamentos

(CAPES, CNPq, FAPERJ e FINEP)

## CÁLCULO DO ELEMENTO DE MATRIZ DE DIPOLO ELÉTRICO PARA O HÉLIO NO FORMALISMO HIPERESFÉRICO

*Mauro Masili*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*J. J. De Groote*

Yale University, New Haven, Connecticut 06511

*J. E. Hornos*

Departamento de Física e Ciência dos Materiais  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave:* coordenadas hiperesféricas, problema de 3 corpos, átomo de hélio

Foi calculada recentemente<sup>1</sup> a energia do estado fundamental ( $L = 0$ ) do átomo de hélio que difere do melhor cálculo variacional em algumas partes por bilhão. Neste trabalho, foi utilizado o método adiabático hiperesférico, demonstrando com resultados precisos que o método é uma alternativa teórica não só pela sua abrangência e simplicidade mas também pela competitividade numérica. Aqui, estendemos o cálculo anterior das curvas de potencial e acoplamentos não adiabáticos para o caso de momentum angular total  $L = 1$ . Isso nos permite calcular o elemento de matriz de dipolo elétrico para as transições discretas do hélio. Também apresentamos algumas energias discretas para os estados envolvidos.

(FAPESP, CNPq)

<sup>1</sup>M. Masili, J. J. De Groote and J. E. M. Hornos, "Hyperspherical adiabatic approach for the helium atom", *Phys. Rev. A* 52, 3362 (1995)

## THE MOLECULAR MODEL OF THREE-BODY COULOMB SYSTEMS APPLIED TO $H^-$

José Rachid Mohallem  
Departamento de Física - ICEx - UFMG  
Rachid@tapajos.fisica.ufmg.br

**Palavras-chave:** molecular model, Coulomb systems, exotic molecules

In a previous work [J. R. Mohallem, Phys. Rev. A 51, 3541 (1995)] a *molecular model* based, in the first stage, in an adiabatic approximation, was developed and applied to three-body ABA Coulomb systems, from  $H_2^+$  to  $Ps^-(e^- e^+ e^-)$ . The wavefunction is factored in a *nuclear* vibrational A-A function and an *electronic* B function. It is shown that the adiabatic energy is accurate even for small values of the mass ratio  $\lambda = m_A / m_B$  that goes up to 1. Now the model is being successfully applied to the two electron atomic ion  $H^-$  ( $\lambda = 1/1836$ ), that is, the atomic wavefunction is described in terms of vibrations of the two electrons, adiabatically followed by the proton. Comparisons of various properties of the system, calculated by an *atomic* (Hartree-Fock) and the *molecular* approaches are thus made.

CNPq, Finep

## SELEÇÃO DE ESTRUTURAS DE MONTE CARLO PARA CÁLCULOS QUÂNTICOS DE EFEITO SOLVENTE

Kaline Coutinho, M. J. de Oliveira e Sylvio Canuto

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** efeito solvente, simulação Monte Carlo, espectro de absorção.

O estudo de propriedades eletrônicas em fase gasosa é hoje bem estabelecido através dos métodos tradicionais de cálculo quântico. Entretanto a grande maioria dos processos químicos são realizados e medidos em fase líquida. Daí surge uma grande necessidade em estudar propriedades eletrônicas de sistemas em fase líquida ou em solução. Em geral, a molécula, que é o alvo do estudo, é embebida num meio que pode ser estudado por modelo de meio contínuo ou modelo de meio discreto.

Neste trabalho apresentamos um método sequencial de uso de simulação computacional (Monte Carlo) e cálculo quântico (Interação de Configuração/Excitação Simples) para calcular o deslocamento no espectro de absorção molecular devido ao efeito solvente. Discutimos os aspectos técnicos da simulação Monte Carlo de um soluto altamente diluído num solvente, como o cálculo das propriedades termodinâmicas e o cálculo de propriedades estruturais (função de distribuição radial e angular), e também discutimos o critério de seleção de estruturas decorrelacionadas para o cálculo quântico através da ineficiência estatística da simulação. Nosso método é aplicado em dois solutos: benzeno (não-polar) e acetona (polar), diluídos em água. Comparamos nossos resultados, para estes sistemas, com os resultados experimentais e os obtidos com modelo de meio contínuo (SCRF). Também discutimos o quão promissor nosso método é para estudar sistemas com interações específicas como pontes de hidrogênio.

(CNPq)

## DETERMINATION OF EXACT CORRELATION POTENTIAL FOR NEGATIVE IONS FROM DIFFUSION MONTE CARLO ELECTRONIC DENSITIES

Paulo H. Acioli and A. C. Pedroza  
Departamento de Física, Universidade de Brasília,  
Brasília, DF, 70.910-900, Brazil

*Palavras-Chave:* density functional theory, correlation potential, quantum Monte Carlo.

The electron affinity, therefore the existence of negative ions, depends mostly on correlation effects. So it is very natural to expect that the potential corresponding to the electronic density of negative ions to be a correlation only potential. In this work we use the diffusion Monte Carlo method, a method that includes correlation effects in a direct and very accurate manner, to obtain very accurate total energies and electronic densities for negative ions of light atoms. We determine the exact (or very accurate) correlation potentials of the ions  $\text{Li}^-$  and  $\text{Be}^-$  corresponding to the electronic densities obtained in our fixed-node diffusion Monte Carlo simulations. We compared these potentials with the known exact correlation potentials for the neutral beryllium atom, obtained from electronic densities of a configuration interaction calculation and neutral lithium, obtained using the Hylleras. We also compares these potentials with the known approximations of the density functional theory such as the local density (LDA), and the Perdew-Wang (PW91) and the Langreth-Mehl (LM) generalized gradient approximations. The knowledge of the exchange-correlation potentials for negative ions obtained in this work is useful in the development of new non-local approximations of density functional theory as well as the improvement of the existing ones.

(CNPq)

## CONSTRUÇÃO DA REPRESENTAÇÃO SIMPLÉTICA IRREDUTÍVEL PARA O MODELO ALGÉBRICO DE EVOLUÇÃO DO CÓDIGO GENÉTICO.

Marconi Soares Barbosa  
Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos  
Instituto de Física de São Carlos-USP

*Palavras-chave:* Código genético, simetrias, operadores de criação

A evolução do código genético tem sido discutida por Hornos & Hornos usando um modelo algébrico baseado na cadeia de álgebras de Lie  $\text{sp}(6) \supset \text{sp}(4) \oplus \text{su}(2) \supset \text{su}(2) \oplus \text{su}(2) \oplus \text{su}(2)$ . Inserindo a álgebra  $\text{sp}(6)$  numa unitária maior, é possível seguir uma análise que se aplica a grupos unitários e seus sub-grupos associados com um nível de um dado momentum angular semi-inteiro  $j$ . Construímos, seguindo o procedimento de Marcos Moshinsky, polinômios em termos de operadores de criação que formam uma base para a irrep (210) de  $\text{sp}(6)$  na cadeia acima. Os elementos da álgebra  $\text{sp}(6)$  podem ser interpretados como operadores diferenciais por serem formados a partir dos geradores da álgebra unitária, e portanto suas atuações nos estados polinomiais são fácil implementação. A ação é muito semelhante a de  $L_+$  e  $L_-$  em estados  $|1, m\rangle$  de  $\text{su}(2)$ , porém, essa ocorre em uma única direção num diagrama de pesos unidimensional (no caso  $m$  é a única componente do vetor peso), enquanto a ação dos elementos de  $\text{sp}(6)$  ocorre num diagrama tridimensional ( $\text{su}(2) \oplus \text{su}(2) \oplus \text{su}(2)$ ) percorrendo os vértices de um octaedro truncado externo e os de um octaedro interno. Um programa em Maple foi concluído para realizar simplificações das ações de qualquer função analítica dos operadores da álgebra, usando um produto escalar adequado. Calculamos todos os elementos de matriz dos operadores da álgebra e de suas potências até grau 3. Regras de seleção foram encontradas. É possível construir operadores que implementam 'mutações não letais'.

A distinção entre representação bosônica e fermiônica nos fornece novas propriedades de simetria do código genético e elimina as ambiguidades relacionadas a associação dos 'estados' com os aminoácidos, garantindo uma forma única de fazê-la.

(CAPES)

## AVALANCHE DYNAMICS IN A PILE OF RICE

*Christensen, Frette, Malthe-Sørenssen, Feder, Jøssang, and Meakin*  
Department of Physics, University of Oslo, Norway

**Key-words:** granular systems, avalanches, transport, self-organized criticality

The idea of self-organized criticality is commonly illustrated conceptually with avalanches in a pile of sand grains. The grains are dropped onto a pile one by one, and the pile ultimately reaches a stationary 'critical' state in which the slope fluctuates about a constant angle of repose, with each new grain being capable of introducing an avalanche on any of the relevant size scales.

Some numerical models of sand-pile dynamics do show SOC, but the behaviour of real sand piles remains ambiguous. Here we report experiments on a granular system - a pile of rice - in which the dynamics exhibit self-organized criticality in one case (for rather elongated grains) but not in another (for less elongated grains). These results show that SOC is not as 'universal' and insensitive to the details of a system as was initially supposed, but that instead its occurrence depends on the detailed mechanism of energy dissipation.

Furthermore, we have studied experimentally transport properties in the rice pile displaying SOC. Tracer particles were added to a pile and their transit times measured. The distribution of transit times is a constant with a crossover to a decaying power law. The average transport velocity decreases with system size. This is due to an increase in the active zone depth with system size. The relaxation processes generate coherently moving regions of grains mixed with convection. This picture is supported by considering transport in a 1D cellular automaton modeling the experiment.

(CNPq)

## IDENTIFICAÇÃO DE PADRÕES DISSIPATIVOS EM UM MODELO PARA OXIDAÇÃO DE CO SOBRE Pt(100).

*Roberto Fernandes Silva Andrade*

Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia

*Diana Lima*

Service de Chimie-Physique - Université Libre de Bruxelles - Belgique

**Palavras-Chaves:** formação de padrões, reação-difusão, espirais

Retomamos a análise de um modelo (1) que descreve o comportamento complexo na oxidação do CO em Pt(100). Ele consiste de 4 equações de difusão-reação envolvendo a cinética química e também a transição de fase entre duas estruturas cristalinas da superfície (100): *1x1* ou *hex*. Estudos anteriores demonstraram a ocorrência de padrões estáticos tipo Turing bem como oscilações homogêneas de toda a superfície. Propagação de frentes de onda tipo alvo foram também observadas quando se permite que a superfície seja inhomogênea. Embora resultados experimentais atribuam a existência de frentes de ondas a defeitos na superfície, este ponto é ainda controverso. Outros estudos teóricos baseados em autómatos celulares encontram frentes de ondas se propagando em superfícies homogêneas. Na presente investigação exploramos as potencialidades do modelo. Usamos os programas desenvolvidos anteriormente para a superfície homogênea, fazendo uma varredura mais fina no espaço de parâmetros do sistema e das condições iniciais. Como principal resultado conseguimos identificar uma grande região de parâmetros onde condições iniciais com descontinuidade na fase geram propagação de ondas planas. Isto corrobora resultados de autómatos celulares e comprova a grande riqueza de comportamento do modelo. Este resultado, no entanto, contrasta com o obtido em grande número de equações de difusão-reação onde a presença de singularidades topológicas com variação de fase de  $2\pi$  dá origem a ondas espirais estáveis. Este padrão, no entanto, ainda não foi detectado em nosso modelo.

(1) R. F. S. Andrade, G. Dewel, P. Borckmans e D. Lima - J. Chem. Phys. 100, 9192 (1994)

## A NEW APPROACH TO PATTERN RECOGNITION: APPLICATIONS

*Borko D. Stošić and Ivon P. Fittipaldi*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Keywords:* pattern, recognition, Ising

Recently we have introduced a novel approach to pattern recognition based on mapping of images onto a multidimensional parameter space defined by a long range interaction Ising model Hamiltonian. The approach is adjustable to various symmetry considerations, and, as opposed to neural networks, it is not hindered by pattern storage capacity. It is shown that different patterns, representing scanned images of printed characters, occupy mutually distant points within the  $n$ -dimensional space defined by a test Hamiltonian with  $n$  terms, while similar patterns occupy nearby points. The computational effort required for recognition of one  $L \times L$  pixel character is roughly  $\frac{1}{4}L^3$ . We apply the new method to analyze more general patterns, in particular, we compare images of original and forged signatures, as well as fingerprints of different persons. We explore different combinations of test Hamiltonian interaction parameters in order to establish the optimum range for quantifying similarity within a given class of patterns. We also apply the method to analyze the coding (exon) and non-coding (intron) sequences in DNA purine-pyrimidine chains.

(CNPq)

## Phase Diffusion in the 1D Coupled Rössler System

*Leonardo Gregory Brunnet*

Institute of Physics, Universidade Federal do RS - Brasil

*palavras-chave:* sistemas complexos, sistemas fora do equilíbrio, sistemas extensos.

The existence of long range order in lattices of diffusively coupled differential equations is investigated. For a lattice of coupled Rössler systems a rotating long-range order is found through numerical simulation for large but finite lattice sizes. Such state can be described in terms of a complex Ginzburg-Landau equation submitted to the local noise produced by the chaotic Rössler units [1]. Despite of the long wavelength fluctuations, from a local point of view the system is smooth and we can define a continuous phase to each oscillatory point in space. From a coarse grained point of view the chaotic fluctuations produced on the phase due to the sensibility to initial conditions on each oscillator play the role of a noise source. We focus then in the the phase fluctuation throughout the system. Whether this phase fluctuations are bound or not is a central question to characterize the long-range order state of the system. Nonlinear stochastic equations such as the KPZ [2] equation predicts unbounded phase fluctuations. In this work we perform numerical simulations to investigate this point. In fact, we found that as time passes by the mean square phase fluctuations around the instantaneous spatial average grows as  $t^{1/3}$  up to a saturation which depends on the system size. The width of the interface produced by the KPZ equation grows as  $t^{2/3}$  so that despite of suggesting a good tool for the characterization of the coupled Rössler system, the agreement is only qualitative.

1. L.G. Brunnet, Hugues Chaté and P. Manneville, *Physica D* **78**, 141 (1994).
2. M. Kardar, G. Parisi and Y.C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).

(CESUP)

## MODELO DE VIDRO DE SPINS COM RÉPLICAS REAIS ACOPLADAS

F.D. Nobre e F.A. da Costa  
Departamento de Física - UFRN

*Palavras-Chave:* Sistemas Desordenados, Vidros de Spins, Réplicas

Modelos de vidros de spins com réplicas reais acopladas (modelos definidos a partir de um Hamiltoniano contendo mais de uma variável de spin, com um acoplamento entre elas), têm sido bastante utilizados recentemente em simulações numéricas (interações de curto alcance), assim como na compreensão do processo de quebra da simetria entre réplicas (interações de alcance infinito). Neste trabalho consideramos um modelo com duas réplicas reais de Ising ( $\tau$  e  $\sigma$ ;  $\tau, \sigma = \pm 1$ ) acopladas, na presença de um campo magnético externo, definido pelo Hamiltoniano,

$$H = - \sum_{(ij)} \frac{1}{2} J_{ij} (\tau_i \tau_j + \sigma_i \sigma_j) - \frac{1}{2} h \sum_i (\tau_i + \sigma_i) - \frac{1}{2} d \sum_i \tau_i \sigma_i,$$

onde as interações  $\{J_{ij}\}$  são de alcance infinito, obedecendo uma distribuição de probabilidades Gaussiana centrada na origem, com largura  $J/\sqrt{N}$ . Estudamos o modelo tanto na formulação de duas réplicas de Ising, como em termos de variáveis de spins vetoriais com duas componentes cartesianas (do tipo utilizadas na definição do modelo relógio com quatro estados). Neste último caso, o acoplamento entre réplicas  $d$  representa um parâmetro de anisotropia o qual, junto com o campo magnético  $h$  privilegiam uma das direções cartesianas. O parâmetro  $r = (1/N) \sum_i \langle \tau_i \sigma_i \rangle$  (onde  $\langle \rangle$  e a barra horizontal representam, respectivamente, as médias térmica e sobre a desordem), apresenta um comportamento em função de  $d$  (abaixo da temperatura crítica de vidro de spins  $T_g$ ), análogo ao da magnetização de um ferromagneto simples em função do campo magnético. Em outras palavras,  $r = r_0$  ( $r = -r_0$ ) quando  $d \rightarrow 0_+$  ( $d \rightarrow 0_-$ ), produzindo assim uma linha de primeira ordem para  $T < T_g$ . No plano  $d/J$  versus  $T/J$ , encontramos também uma transição contínua associada ao parâmetro de ordem de vidro de spins; a fase de vidro de spins é caracterizada pelo privilégio de uma das direções cartesianas, dependendo do sinal de  $d$ .

## MAGNETOIMPEDÂNCIA GIGANTE NO (110)[001] FeSi<sub>3%</sub>

M. Carara e R. L. Sommer

Departamento de Física UFSM, Santa Maria RS

*palavras-chave:* magnetoimpedância, permeabilidade, processos de magnetização.

Recentemente impedâncias dependentes da magnitude de um campo DC externo foram observadas em materiais amorfos de alta permeabilidade, sejam eles fios[1], fitas[2,3] ou filmes [1, 3]. O efeito magnetoimpedância (MI) tem magnitudes que atingem 400% nos casos mais favoráveis. A origem do mesmo é a dependência do "skin depth" e consequentemente da impedância do material, com a permeabilidade diferencial efetiva. Esta última está associada aos processos de magnetização excitados pelo campo *ac* produzido pela corrente de sonda  $I_{oc}^{int}$ . A maior parte dos resultados publicados na literatura são para ligas amorfas com magnetostricção próxima de zero. Entretanto, resultados favoráveis tem sido obtidos em fios [4] e filmes [5] de materiais altamente magnetostrictivos. Até o momento nenhum resultado de magnetoimpedância em materiais metálicos monocristalinos foi publicado, apesar de os mesmos apresentarem os ingredientes básicos para a existência de (MI): alta permeabilidade e anisotropia magnética bem definida[1-3]. Com o objetivo de preencher esta lacuna, neste trabalho apresentamos os resultados obtidos para a MI em ligas cristalinas de FeSi<sub>3%</sub>, altamente texturizadas [6]. Amostras de lâminas comerciais de aço silício do tipo AISI M5 com textura (110)[001] cortadas por eletro-erosão tiveram a sua MI medida a diversos ângulos entre a direção da corrente de sonda e os eixos cristalinos. Foram obtidas MI com magnitudes da ordem de 200% para frequências e magnitudes de corrente de sonda apropriadas. Os resultados confirmam o efeito skin como a origem da MI. As diferenças entre as magnitudes obtidas para o efeito e também a forma das curvas de MI vs. H são discutidas em termos dos processos de magnetização do FeSi<sub>3%</sub>(110)[001].

1. L. V. Panina, K. Mohri, T. Uchiyama, and M. Noda, IEEE Trans. Magn. **31**, 1249 (1995).
2. F. L. A. Machado, C. S. Martins, and S. M. Rezende, Phys. Rev. **B51**, 3926 (1995).
3. R. L. Sommer and C. L. Chien, Appl. Phys. Lett. **67**, 857 (1995).
4. M. Knobel et. al., J. Phys.: Condens. Matter **7** (1995) L115.
5. R. L. Sommer and C. L. Chien, Appl. Phys. Lett. **67**, 3346 (1995).
6. M. Carara and R. L. Sommer, submetido a Phys. Rev. B.

## MEDIDAS DE SUSCEPTIBILIDADE TRANSVERSAL E OBSERVAÇÕES DE DOMÍNIOS POR EFEITO KERR MAGNETO-ÓPTICO

Cezar S. Martins, Luiz G. C. Melo, Antonio D. Santos e Frank P. Missell

Departamento de Física dos Materiais e Mecânica-Instituto de Física-USP

*Palavras-Chave:* efeito Kerr, magnetoimpedância, domínios

Recentemente foi observado<sup>1,2</sup> o efeito de Magnetoimpedância Gigante em fitas ferromagnéticas amorfas Co<sub>70,4</sub>Fe<sub>4,6</sub>Si<sub>1,5</sub>B<sub>10</sub>. Modelos teóricos<sup>3</sup> indicam que a GMI escala com a permeabilidade transversal. No presente trabalho apresentamos medidas da susceptibilidade transversal<sup>4</sup> em fitas amorfas ferromagnéticas usando efeito Kerr magneto-óptico transversal (TMOKE). As amostras foram tratadas termicamente a 300°C durante 15min. e em um campo perpendicular de 3kOe. O campo magnético DC foi variado de 0 a 40Oe. Para realização das medidas magneto-ópticas foi feito um polimento com pasta de diamante e depositado uma camada anti-refletores de 33nm de ZnS. Uma corrente *ac* foi aplicada na amostra de forma a produzir um campo circunferencial, a amplitude e a frequência da corrente foram variadas de 1 a 25mA e entre 500Hz e 100kHz, respectivamente. A susceptibilidade transversal apresenta um comportamento semelhante ao da magnetoimpedância, ou seja, apresenta um pico para campos baixos e este pico depende fortemente da amplitude e da frequência da corrente. Observamos também a estrutura de domínios variando a amplitude e a frequência da corrente e condições de tratamento térmico.

( FAPESP, FINEP e CNPq )

<sup>1</sup>F.L.A. Machado, B.L. da Silva, S.M. Rezende and C.S. Martins, J. Appl. Phys. **75**, 6563(1994).

<sup>2</sup>F.L.A. Machado, C. S. Martins and S.M. Rezende, Phys. Rev. B **51**, 3926 (1995).

<sup>3</sup>L.V. Panina, K. Mohri, T. Uchiyama, N. Noda, and K. Buchida, IEEE Trans. Magn. **31**, 1249 (1995).

<sup>4</sup>A.D. Santos, L.G.C. Melo, C.S. Martins, F.P. Missell, F.L.A. Machado and S.M. Rezende, J. Appl. Phys. **8**, April (1996)

## EFEITO DA TEMPERATURA NA GLMI NA LIGA AMORFA $\text{Co}_{70.4}\text{Fe}_{4.6}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$

*Kênia Carvalho Mendes<sup>+</sup> e Fernando Luis de Araujo Machado,*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, 50670-901 Recife-PE Brasil

**Palavras Chave:** magnetoimpedância, amorfos, magnetismo

Recentemente, foi descoberto nas fitas amorfas  $\text{CoFeSiB}$  um efeito denominado magnetoimpedância gigante<sup>1,2</sup> (GMI). Em geral, obtém-se uma GMI da ordem de 30% à temperatura ambiente. No presente trabalho, investigamos o efeito da temperatura na GMI longitudinal (GLMI) em fitas de  $\text{Co}_{70.4}\text{Fe}_{4.6}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ , para  $298 \leq T \leq 433\text{K}$  e  $-40 \leq H \leq 40\text{Oe}$ , em pedaços de fitas com (CT) e sem tratamento térmico (ST). Após cada medida em uma dada temperatura, foi feita uma outra à temperatura ambiente, repetindo esse ciclo em todo intervalo de temperatura investigado. Nas amostras ST, quando o efeito foi medido para temperaturas maiores que a ambiente, a GLMI apresentou um crescimento gradual de 45% para 90% no intervalo  $298 \leq T \leq 353\text{K}$ . Nessas mesmas amostras, quando o efeito foi medido a temperatura ambiente, a GLMI aumentou consideravelmente, atingindo 130%. Para as medidas feitas nas amostras CT, foi observado que o valor da GLMI permaneceu praticamente constante até  $T=368\text{K}$ , diminuindo o seu valor para temperaturas mais elevadas. No entanto, nessas mesmas amostras, a temperatura ambiente, a GLMI apresentou um discreto crescimento até 373K. A grande variação da GLMI com T nas amostras ST, pode ser atribuída ao aumento da permeabilidade magnética e a variação de resistividade, resultantes das mudanças estruturais. Os presentes resultados, podem também ser explicados pelo mesmo modelo teórico usado para descrever as dependências com campo magnético e frequência na GLMI em fitas amorfas<sup>3</sup>.

(FINEP, PADCT, CNPq, FACEPE e CAPES)

<sup>+</sup>Endereço permanente: Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Estadual da Paraíba

1 - F.L.A. Machado, C.S. Martins, and S.M. Rezende, *Phys. Rev. B* **51**, 3926 (1995).

2 - K.C. Mendes, et al., *J. Appl. Phys.* **79**, (1996).

3 - F.L.A. Machado, and S.M. Rezende, *J. Appl. Phys.* **79**, (1996).

## INVAR LIKE PROPERTIES IN AMORPHOUS METALS

*<sup>1</sup>Bachir Hallouche, Marines G. M. Miranda, Mario N. Baibich*

<sup>1</sup>Instituto de Física, PUCRS

C.P. 1429, 90619-900 Porto Alegre, RS

Instituto de Física, UFRGS

C.P. 15051, 91501-970 Porto Alegre, RS

**Palavras-Chave:** amorfos, transição invar, relaxação estrutural

The physical properties of a series of amorphous alloys, with general composition written as  $\text{Fe}_{72-x}\text{Ni}_x\text{Si}_8\text{B}_{14}$ , has been studied in order to establish the importance of the observed transition, equivalent to the Invar bcc-fcc transition in their crystalline counterparts. The samples were obtained by melt-spinning the alloys in air, and their amorphous state verified through standard X-Ray diffraction. We present, in this work, our results for the distribution of activation energies for structural relaxation, new data on the magnetic hysteresis, Hall effect and careful X-Ray diffraction analysis. The relaxation spectra was obtained by interpreting the thermomagnetic plots at different heating rates, so as to explain the apparently unphysical result shown for the high Ni content end of the concentration range. Also, the crystallization energy maximum, seen for the  $x=25$  sample, is shown to be connected to the Invar transition between the bcc and fcc structures in the crystalline state. Following the criterion for stability of a particular amorphous composition, where it is said that an amorphous phase can be formed (and is stable) when crystallization can lead the alloy to, at least, two different low energy crystalline configurations, this sample has a larger activation energy for it fulfills the requirement stated above. Evidence of this transition is seen as well in the behavior of the Curie temperatures, the activation energies for crystallization and the anisotropic fields obtained from the analysis of Mössbauer spectra. All these measured quantities show a clear transition from one "local" environment to another, as confirmed by the X-Ray diffraction studies.

(CNPq, FAPERGS, FINEP, PADCT).

## AQUECIMENTO JOULE EM FIOS E FITAS AMORFOS

*Marcelo Knobel, Fábio César Siqueira da Silva*

DFESCM - Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

*Horia Chiriac*

Institute of Technical Physics, Iasi, Romênia

*Palavras-Chave:* aquecimento Joule, ferromagnetos amorfos, tratamentos térmicos

O aquecimento Joule tem se mostrado um método bastante eficaz para realização de tratamentos térmicos rápidos em metais magnéticos. Em particular, o uso do aquecimento Joule tem se difundido bastante em ferromagnetos amorfos, onde é possível induzir anisotropias específicas e provocar a cristalização controlada de diversos sistemas [1]. Neste trabalho apresentamos o sistema experimental para a realização de aquecimento Joule recentemente montado no Laboratório de Materiais e Baixas Temperaturas, da UNICAMP. Foi desenhado e montado um suporte de amostra que minimiza os contatos térmicos, para evitar perdas de calor por condução. Uma corrente elétrica (de até 20 A) passa através da amostra por um tempo controlado por um computador. Além disso, é possível acompanhar as variações da resistividade elétrica durante o tratamento térmico medindo a voltagem na amostra durante o aquecimento. Serão apresentados resultados obtidos em fitas amorfas de  $\text{Fe}_{73.5}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$  e  $\text{Fe}_{86}\text{Zr}_7\text{B}_6\text{Cu}_1$ , onde o produto final são materiais nanocristalinos com ductilidade melhorada. Além disso, será mostrada uma teoria recentemente desenvolvida para o aquecimento Joule em fios amorfos [1], que indica que os tratamentos térmicos em fios, assim como no caso das fitas, são bastante uniformes. A teoria será comparada com os dados experimentais obtidos para fios amorfos a base de Fe e Co. (FAPESP, CNPq e CAPES)

[1] M. Knobel *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **28**, 2398 (1995).

## SIMULAÇÃO DA CRISTALIZAÇÃO EM METAIS AMORFOS

*Kleber Roberto Pirola, Marcelo Knobel*

DFESCM - Instituto de Física "Gleb Wataghin" - Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

*P. Allia*

Dip. di Fisica, Politecnico di Torino, Torino, Itália

*Palavras-Chave:* metais amorfos, cristalização, cinética de Johnson-Mehl-Avrami

Os ferromagnetos amorfos possuem diversas propriedades magnéticas interessantes, que vêm sendo aplicadas em diversos dispositivos tecnológicos. Em anos recentes tem se verificado que a cristalização controlada destes metais amorfos (levando à cristalização superficial, micro- ou nanocristalização) pode levar a uma melhoria de algumas propriedades magnéticas, permitindo a fabricação de materiais para aplicações específicas.

Com o objetivo de simular a cinética de um processo de cristalização particular em um metal amorfo, foi desenvolvido um método de resolução de uma equação diferencial não-linear, que leva em consideração o calor extra gerado no processo de cristalização e as perdas de calor por radiação. No problema considerado, é dado um pulso de calor localizado em um ponto da amostra, e através de um método de solução auto-consistente, seguimos o perfil de temperatura no material em função do tempo. Para descrever corretamente o fenômeno, utilizamos os parâmetros térmicos do metal amorfo  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$ , e levamos em consideração uma transformação estrutural que segue uma cinética do tipo Johnson-Mehl-Avrami (JMA). Resultados preliminares indicam que para determinados valores da temperatura do meio e do pulso de calor, pode ocorrer uma cristalização auto-sustentada no material, gerada a partir de uma reação em cadeia de cristalização exotérmica de regiões adjacentes na amostra. (FAPESP e CNPq)

## EFEITOS DO CARREGAMENTO CATÓDICO NA PERMEAÇÃO DO HIDROGÊNIO NAS LIGAS METÁLICAS AMORFAS $\text{Ni}_{81}\text{P}_{19}$ e $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{38}\text{Mo}_4\text{B}_{18}$

D. S. dos Santos & P.E.V. de Miranda  
COPPE/UFRJ

*Palavras-Chave:* hidrogênio, difusão, solubilidade, hidreto

Amostras das ligas metálicas amorfas  $\text{Ni}_{81}\text{P}_{19}$  e  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{38}\text{Mo}_4\text{B}_{18}$ , fabricadas pela técnica de processamento por solidificação rápida, denominada "melt-spinning", foram submetidas a testes eletroquímicos de permeação do hidrogênio. A técnica eletroquímica utilizada foi a duplo-potenciostática. Os testes foram conduzidos à 40° C, usando-se como eletrólito solução de NaOH 0,1N.

Foi verificado para a liga  $\text{Ni}_{81}\text{P}_{19}$ , para a variação de potenciais catódicos na faixa de -1350 a -2000 mV/ECS, que os parâmetros de permeação do hidrogênio (difusibilidade aparente,  $D_{ap}$ , solubilidade aparente,  $S_{ap}$ , e fluxo no estado estacionário,  $J_{\infty}$ ), aumentam a medida que o carregamento catódico aumenta. As curvas de permeação do hidrogênio para o  $\text{Ni}_{81}\text{P}_{19}$  apresentaram comportamento sigmoidal simples. Já para a liga  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{38}\text{Mo}_4\text{B}_{18}$ , para a faixa de variação de potenciais catódicos entre -1100 a -2000 mV/ECS, observou-se que  $D_{ap}$ ,  $S_{ap}$  e  $J_{\infty}$  aumentam com o aumento do carregamento catódico, porém de forma diferenciada. Para carregamentos catódicos entre -1100 a -1350, as curvas de permeação apresentaram comportamento sigmoidal simples, enquanto que para potenciais catódicos superiores à -1350 mV/ECS as curvas de permeação apresentaram comportamento duplo-sigmoidal, característico da formação da fase hidreto durante a permeação do hidrogênio. Isto provocou um considerável aumento do fluxo no estado estacionário o que resultou em um expressivo aumento dos valores de solubilidade sólida. Estes valores de solubilidade sólida do hidrogênio para as ligas  $\text{Ni}_{81}\text{P}_{19}$  e  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{38}\text{Mo}_4\text{B}_{18}$  são maiores que aqueles apresentados pelo níquel e ferro líquidos.

Os autores agradecem ao apoio financeiro do (CNPq, nº 523697/94-5) e ao (PADCT, nº 62.0114/92.4).

## DIFRACTION COMBINED WITH SURFACE ACOUSTIC WAVE EXCITATION

*E. Zolotoyabko*

Faculty of Materials Engineering, Technion-Israel  
Institute of Technology, Haifa 32000, Israel

**Key-Word:** X-ray diffraction, surface acoustic waves, Brillouin scattering

There is an increasing interest today in the combined use of surface acoustic waves (SAW) with X-ray diffraction for various applications. This includes control of intensity, energy band, geometrical dimensions of X-ray beams on the synchrotron beamlines, strain measurements in electronic materials and in elements of microelectronics devices, as well as measurements of acoustic fields inside acousto-optical devices used in optical communication systems. Under diffraction conditions inelastic interaction between X-rays and SAW phonons, i.e. Brillouin scattering, is extremely sensitive to the small SAW amplitudes well below 1 pm. Using proper scattering geometry the influence of acoustic mode with specific polarization may be selected. The situation becomes complicated in real systems when static strains compete with dynamic deformations induced by SAW. This report is focused on the key problem of X-ray diffraction in the presence of static and dynamic deformation fields, which impedes development of this topic. Theoretical results will be illustrated by experimental data taken by means of double-crystal diffractometry, grazing incidence diffraction and X-ray topography, using X-rays from sealed tubes and synchrotron beamlines.

## VELOCIDADE DO SOM EM CRISTAIS PIEZOELÉTRICOS

*Rubens Silva*

Escola Técnica Federal do Pará, Belém-Pa.

*Sanclayton G. C. Moreira*

Universidade Federal do Pará, Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e Naturais,  
Campus do Guamá, Belém-Pa.

A velocidade do som em um determinado meio material é uma grandeza importante pois ela depende diretamente dos valores das constantes elásticas desse meio. Portanto, esse valor pode caracterizar o meio em estudo.

Várias técnicas podem ser utilizadas com esta finalidade, porém, em todas elas há sempre a presença de uma fonte externa que produz o som (auto-falante) e um detector (microfone).

Conseguimos medir a velocidade do som numa amostra cristalina de Sal de Rochelle, usando-se para isto, um sistema inédito, que estamos chamando de sistema de 3 eletrodos.

Num sistema de 3 eletrodos, a amostra cristalina é cortada na forma de uma placa com a maior área perpendicular ao eixo piezoelétrico. É aplicado um campo elétrico AC numa certa região desta maior área e em outra região da mesma face é retirado sinal.

A diferença de fase entre o sinal de entrada e o de saída é lida por um Lock-in com alta precisão e pode ser transformada num defasagem espacial devido a equivalência:

$$1 \text{ Período (tempo)} = 1 \lambda \text{ comprimento de onda (espaço)} = 2\pi \text{ (ângulo)}.$$

Os resultados encontrados estão em completo acordo com os já conhecidos na literatura, porém o mais importante é que usando-se o sistema de 3 eletrodos não precisamos nem de auto-falante nem de microfone para efetuarmos as medidas. O cristal, sendo piezoelétrico, assume as duas funções de uma forma contínua e bem mais simples que a utilizada nos métodos tradicionais.

A limitação desta técnica, no entanto, reside no fato que ela só pode ser aplicada para calcular a velocidade do som em cristais piezoelétricos.

Apoio: Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação da UFPA.

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ELÁSTICAS DO FULERENO C<sub>70</sub>

Juan B.M.Barrio<sup>a,b</sup>, Nikolai P. Tretiakov<sup>a</sup>, Viatcheslav.I.Zubov<sup>a</sup>

a-Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

b-Departamento de Matemática e Física da Universidade Católica de Goiás-GO

**Palavras-Chave:** 1) Fulereo C<sub>70</sub> ; 2) propriedades termodinâmicas ; 3) estabilidade

Apesar da grande quantidade de fulerenos identificados, o C<sub>60</sub> é o único relativamente bem conhecido, enquanto sobre o segundo em importância, o C<sub>70</sub>, poucos estudos tem sido efetuados. Para altas temperaturas, este fulereo apresenta uma estrutura cúbica de faces centradas, FCC, com forte anarmonicidade, e assim podemos considerar para nossos cálculos a aproximação baseada no método correlativo não simetrizado do campo auto-consistente para cristais fortemente anarmonicos desenvolvido por Zubov et al. [1]. Para as forças intermoleculares, usamos o potencial proposto por Verheijen et al. [2], e para o espectro vibracional os dados fornecidos por Onida et al. [3]. Calculamos as isóbaras para a fase FCC do C<sub>70</sub> sendo que os dois braços convergem à mesma temperatura T<sub>s</sub>, acima da qual a equação de estado não possui raízes reais. O braço inferior representa os estados termodinamicamente estáveis, enquanto no superior estão os estados instáveis. A temperatura T<sub>s</sub> é da ordem de 1940K e representa a perda da estabilidade, sendo para o C<sub>70</sub> ligeiramente superior à do C<sub>60</sub>. As propriedades elásticas e termodinâmicas foram calculadas ao longo do braço inferior da isóbara, e os valores obtidos coincidem satisfatoriamente com os dados experimentais. Na tabela abaixo apresentamos: distancia intermolecular a, calor específico C<sub>v</sub> e módulo elástico isotérmico B<sub>T</sub>.

T(K)	300	700	900	1300	1500	1900
a (Å)	10.570	10.613	10.637	10.697	10.736	10.888
C <sub>v</sub> (cal/molK)	130.86	299.97	336.98	373.04	382.26	393.03
B <sub>T</sub> (kbar)	165.38	126.41	108.25	73.212	55.595	9.0389

[1] V.I. Zubov, N.P.Tretiakov, J.N.Teixeira Rabelo, J.F.Sanchez Ortiz; Phys. Letters A, 194, 223(1995).

[2] M.A.Verheijen et al. ; Chem. Phys. , 166, 287(1992).

[3] G.Onida; W.Andreoni; J.Kohanoff et al. ; Chem. Phys. Letters, 219, 1(1994).

## A RELAXAÇÃO MAGNÉTICA NUCLEAR DO $^{19}\text{F}$ EM VIDROS FLUORADOS

L. T. S. Auler<sup>1</sup>, P. L. Frare<sup>1</sup>, C. J. Magon<sup>1</sup>, M. A. Ferraz<sup>1</sup>, L. N. Oliveira<sup>1</sup>, J. P. Donoso<sup>1</sup>,  
Y. Messaddeq<sup>1,2</sup> e A. A. S. T. Delben<sup>3</sup>

<sup>1</sup>DFI - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

<sup>2</sup>Instituto de Química, Unesp - Araraquara

<sup>3</sup>Depto. de Física, CCET, UFMS

*Palavras Chave:* relaxação spin-rêde, relaxação spin-spin, vidros fluorados.

O estudo de sistemas vítreos fluorados com alta condutividade aniônica tem atraído grande interesse pelos problemas físicos associados aos processos de transporte iônico em sistemas desordenados. Apresentamos neste trabalho um estudo de RMN da relaxação nuclear do  $^{19}\text{F}$  em dois sistemas vítreos fluorados: (a)  $\text{InF}_3 - \text{ZnF}_2 - \text{SrF}_2$  (uma amostra pura e outra dopada com 0.1% de  $\text{Gd}^{3+}$ ) e (b)  $\text{ZrF}_4 - \text{BaF}_2 - \text{LiF}$ . As medidas da relaxação spin-rêde e da relaxação spin-spin foram realizadas nas frequências de 24.6 e 37 MHz cobrindo a faixa de temperatura de 185 à 1000 K, ou seja, acima e abaixo da temperatura de transição vítrea  $T_g$ . Três mecanismos de relaxação spin-rêde foram investigados. Abaixo de  $T_g$ , na fase vítrea, encontramos que  $T_1^{-1}$  é fracamente dependente da frequência ( $T_1^{-1} \propto \omega$ ) e da temperatura, como já foi observado em outros sistemas vítreos [1]. Acima de  $T_g$ , onde começa o processo de cristalização,  $T_1^{-1}$  passa a ter um comportamento típico de sistemas com movimento iônico termicamente ativado, crescendo acentuadamente com a temperatura e passando por um máximo. A energia de ativação encontrada neste regime foi da ordem de 1 eV. Finalmente, na amostra dopada com  $\text{Gd}^{3+}$ , a presença de impurezas paramagnéticas aumenta a taxa de relaxação spin-rêde sem alterar significativamente o comportamento em função da temperatura e da frequência observados na amostra pura. Explicamos a influência dos íons paramagnéticos sobre  $T_1^{-1}$  através do acoplamento dipolar entre os núcleos de flúor e os spins eletrônicos. O comportamento  $T_2^{-1}$  em função de  $T$  é bastante distinto nas amostras pura e dopada paramagneticamente. Enquanto na amostra pura  $T_2^{-1}$  decresce com o aumento de  $T$ , na amostra dopada  $T_2^{-1}$  passa por um mínimo e volta a crescer a mais altas temperaturas. Este comportamento é similar ao observado nas fluoritas dopadas, cuja explicação é dada por um modelo originalmente proposto por Vernon *et al* [2].

[1] R. Küchler *et al*, J. Non-Cryst. Solids 172-174, 1373 (1994). [2] S.P. Vernon *et al*, Phys. Rev. B 24, 3756 (1981).

## CARACTERIZAÇÃO DE SISTEMAS VÍTREOS POR TÉCNICA INTERFEROMÉTRICA

I.C.S. Carvalho<sup>1</sup>, F.C. Garcia<sup>2</sup>, E.N. Hering<sup>2</sup>, L.C.G. Valente<sup>2</sup>, W. Margulis<sup>2</sup>,  
B. Lesche<sup>3</sup>, A. Assek<sup>4</sup>, F. Laurell<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade Estadual do Rio de Janeiro-RJ

<sup>2</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro-RJ

<sup>3</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro-RJ

<sup>4</sup>Fysik II, Royal Institute of Technology, Stockholm, S10044

*Palavras-Chave:* polarização, vidros, interferometria

É possível induzir efeitos não-lineares de segunda ordem em sistemas vítreos, tais como fibras, filmes ou amostras de sílica (*bulk*), submetendo a amostra a altas voltagens e calor. Grava-se desta forma um campo elétrico permanente, e o vidro permanece polarizado a temperatura ambiente. Neste trabalho apresentamos uma técnica simples para a determinação da distribuição de cargas em vidros polarizados com uma resolução submicrométrica. Discos de 1mm de espessura de  $\text{SiO}_2$  foram polarizados a 250°C com 3kV aplicados. Após ser submetida à polarização, a amostra foi posicionada horizontalmente. As reflexões de um feixe de He-Ne incidindo verticalmente sobre este disco deram origem a um padrão de interferência, cujas franjas foram monitoradas em tempo real. Enquanto a face superior dava origem a um sinal refletido de referência, a face inferior era atacada quimicamente por ácido fluorídrico (HF), alterando o caminho óptico da luz refletida e o padrão de interferência. Utilizou-se vidros que apresentavam uma região polarizada e uma não polarizada. A região não polarizada apresentou um padrão de franjas periódico e harmônico, implicando em uma taxa de ataque constante. As amostras polarizadas se caracterizaram por uma forte modulação na frequência, devido à presença de cargas positivas ou negativas que resultaram em taxas de ataques diferentes. Desta forma o padrão da medida interferométrica foi usado para inferir a distribuição de cargas em vidros polarizados, podendo ser estendido para diversas condições de polarização e permitindo também a determinação da variação da taxa de ataque do vidro quando se aplica um campo elétrico.

(CNPq, FINEP, MCT)

## CARACTERIZAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE CARGAS EM VIDROS POLARIZADOS

F.C.Garcia<sup>1</sup>, E.N.Hering<sup>1</sup>, L.C.G.Valente<sup>1</sup>, W.Margulis<sup>1</sup>,  
A.Asseh<sup>2</sup>, F.Laurell<sup>2</sup>, I.B.Lesche<sup>3</sup>, I.C.S.Carvalho<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro-RJ

<sup>2</sup>Fysik II, Royal Institute of Technology, Stockholm, S10044

<sup>3</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro-RJ

<sup>4</sup>Instituto de Física, Universidade Estadual do Rio de Janeiro-RJ

**Palavras-Chave:** polarização, vidros, dobra de frequência

É possível polarizar (*pole*) vidros diversos através da aplicação de um campo elétrico intenso (~3 kV/mm) e alta temperatura (~300°C). Como esta modificação é permanente à temperatura ambiente, o efeito pode ser utilizado na fabricação de chaves, moduladores e memórias ópticas. Neste trabalho utilizamos vidros soda-lime (lâminas de microscópio) e vidros de sílica pura de um milímetro de espessura. No primeiro, aplicamos uma tensão de 3kV a uma temperatura de 70°C, para não romper a rigidez dielétrica do vidro. No segundo, a temperatura média foi de 300°C, com a mesma tensão. Os eletrodos utilizados eram de alumínio evaporado ou de latão por contato, e o tempo médio de *poling* foi de uma hora. A corrente elétrica através da amostra também foi monitorada durante este período. Nos vidros de soda-lime, observamos que se forma uma camada ligeiramente turva (branca e solúvel em água) e que a região polarizada não embaça. Isso sugere que haja uma movimentação de íons e cargas presentes nestas amostras. Com o subsequente aprisionamento das cargas a temperatura ambiente, o campo elétrico fica gravado de forma permanente. A caracterização destas amostras pode ser feita através da geração de segundo harmônico pelo vidro, ou ainda através da taxa de ataque do vidro com ácido fluorídrico, que é afetada pela presença de uma distribuição de cargas. Um laser de He-Ne foi utilizado para medir interferometricamente esta taxa de ataque, em uma região polarizada e outra não polarizada. Comparando-se os padrões de interferência correspondentes a estas duas regiões, encontrou-se assim a distribuição de cargas no vidro.

(CNPq)

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMICAS EM VIDROS DO SISTEMA

**0.3La<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-0.7Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>**

E. M. Marmolejo, N. Aranha, J. A. Medeiros Neto, R. F. Cuevas,  
O. L. Alves, C. L. Cesar and L. C. Barbosa

Universidade Estadual de Campinas, P. O. Box 6165, Campinas, SP

**Palavras chaves:** Vidros Calcogenetos, Amplificadores ópticos, Vidros ópticos

O sistema vítreo calcogeneto 0.3La<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-0.7Ga<sub>2</sub>, apresenta excepcionais propriedades ópticas, além de quando dopados com elementos de terras raras, apresentarem eficiências quânticas da ordem de 70%, tornando este material um potencial candidato para aplicação como amplificador óptico. O estudo do comportamento térmico de vidros é importante para se entender as propriedades térmicas destes materiais. Três importantes eventos com relação à temperatura caracterizam os sistemas vítreos, isto é, a temperatura de transição vítrea T<sub>g</sub>, a temperatura de cristalização T<sub>x</sub> e a temperatura de fusão T<sub>m</sub>. A diferença (T<sub>x</sub>-T<sub>g</sub>) é um bom indicador da estabilidade térmica dos vidros, quanto maior esta diferença, mais estável será o sistema vítreo. Por outro lado, Hruby utiliza o parâmetro:

$H_r = \frac{T_x - T_g}{T_m - T_x}$ , como uma tendência formadora de vidro. Utilizamos a técnica de análise térmica diferencial (DTA) a nosso material utilizando amostras sólidas, obtendo os seguinte resultados:

Vidro	T <sub>g</sub> (°C)	T <sub>x</sub> (°C)	T <sub>m</sub> (°C)	T <sub>x</sub> -T <sub>g</sub>	T <sub>m</sub> -T <sub>x</sub>	H <sub>r</sub>
GLS	570	680	850	110	175	0,62

Para nosso sistema vítreo o coeficiente de expansão térmica  $\alpha$  foi determinado entre 200-300°C, a temperatura de transição vítrea dilatométrico T<sub>g</sub>=450°C, a temperatura de amolecimento T<sub>d</sub>=533°C e o coeficiente de expansão térmica da ordem de  $\alpha=16,46 \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$ . A estabilidade térmica é extremamente boa, pois foi de 110 e o coeficiente de Hruby encontrado do termograma foi de 0,62, valores estes semelhantes aos encontrados na literatura. Entretanto, foi possível constatar que este sistema vítreo deve apresentar sérias dificuldades para o puxamento de fibras, devido a que a temperatura de puxamento está muito próxima de T<sub>x</sub>. CNPq, PADCT, FINEP, TELEBRAS, FAPESP

## EFFICIENT SECOND-HARMONIC GENERATION IN PRASEODYMIUM-DOPED GA:LA:S GLASS FOR 1.3 $\mu\text{m}$ OPTICAL FIBER AMPLIFIERS

*M.T. de Araujo<sup>a</sup>, M.V.D. Vermelho<sup>a</sup>, A.S.Gouveia-Neto<sup>a</sup>, A.S.B. Sombra<sup>b</sup> and J.A. Medeiros Neto<sup>c</sup>*

<sup>a</sup> Departamento de Física-UFAL, <sup>b</sup> Departamento de Física-UFC and <sup>c</sup> Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Key-words: glass, praseodymium, second-harmonic

In this work, we report on efficient frequency doubling of 1.319  $\mu\text{m}$  and 1.064  $\mu\text{m}$  Nd:YAG lasers pulses in  $\text{Pr}^{3+}$ -doped and  $\text{Pr}^{3+}$ -free Ga:La:S glasses for optical fiber amplifiers in the region of the 1.3  $\mu\text{m}$ . The samples were semi-disk shaped with about 1" diameter and 3 mm thick. The samples were pumped in the axis direction. Power spectra of the second-harmonic (SH) signal at 660 nm (a) and 532 nm (b) generated in a 3 mm thick sample of  $\text{Pr}^{3+}$ -doped Ga:La:S glass is observed. The narrow spectral bandwidth of both spectra, suggests a parametric frequency doubling process taking place. Moreover, the second-harmonic light at 660 nm and 532 nm, were the sole detectable visible-wavelength signals generated in the spectral region of 300-700 nm. For comparison, we have tested a Praseodymium-free glass sample with the same composition as the doped-one and results revealed essentially no difference between the spectra and the ones obtained from the  $\text{Pr}^{3+}$ -free samples. However, the conversion efficiency was lower for the undoped samples. The frequency-doubled light power as a function of fundamental pump power was analysed. The signal power at 660 nm presented a quadratic dependence upon fundamental radiation power at 1.319  $\mu\text{m}$ . The same behavior was observed when the samples were pumped at 1.064  $\mu\text{m}$ , although with much lower conversion efficiency, mainly due to the much lower peak power of the laser.

## AVALANCHE DE FÓTONS EM VIDROS FLUORINDATOS DOPADOS COM ÉRBIO

W. Lozano B. <sup>(a)</sup>, Cid B. de Araujo <sup>(a)</sup>, Y. Messaddeq <sup>(b)</sup>, M.A. Aegerter <sup>(c)</sup>

<sup>(a)</sup>Departamento de Física-UFPE; <sup>(b)</sup>Departamento de Química-UNESP;

<sup>(c)</sup>Institut für neue Materialien, Alemanha

*Palavras-chave:* íons de terras raras, vidros fluoroindatos, avalanches de fótons

Os vidros fluoroindatos apresentam alta transparência na região de 250nm até 8 $\mu\text{m}$ , são resistentes à umidade e neles podem ser incorporados grandes concentrações de terras-raras. Neste trabalho observamos a conversão ascendente de frequências mediada pelo efeito de avalanche de fótons em fluoroindatos dopados com  $\text{Er}^{3+}$ . O vidro usado tem a composição (mol %) 36InF<sub>3</sub>-20ZnF<sub>2</sub>-16BaF<sub>2</sub>-20SrF<sub>2</sub>-2GdF<sub>3</sub>-2NaF-1GaF<sub>3</sub>-3ErF<sub>3</sub>. A avalanche de fótons foi observada em vidros há cerca de 3 anos [1,2]. Naquelas experiências as frequências dos lasers usados não são ressonantes com transições envolvendo o estado fundamental. O meio é transparente no limite de baixa intensidade do laser incidente. Para potências maiores que um certo valor crítico a amostra apresenta forte absorção não-linear. Ao mesmo tempo a radiação emitida com frequência maior que a do laser apresenta uma forte redução no tempo de crescimento do sinal para intensidades crescentes do laser. Na presente experiência a frequência do laser correspondente a 790 nm está próxima de ressonância com a transição  $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$  do  $\text{Er}^{3+}$  e com transições entre estados excitados ( $^4I_{11/2} \rightarrow ^4F_{3/2}$ ,  $^4F_{3/2}$ ). Avalanche foi monitorada através da emissão  $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  em ~550nm cuja intensidade depende fortemente da intensidade incidente (inclinação 5 num gráfico log-log). A potência correspondente ao limiar da avalanche foi  $\approx 3.6$  mW, focalizada com uma lente de distância focal de 10cm de distância focal. Os resultados são descritos por equações de taxa para as populações dos estados envolvidos no processo.

[1] Gomes et al., Opt. Commun. 103, 361(1993)

[2] Auzel et al., J. Lumin. 60-61, 692 (1994)

## CONVERSÃO ASCENDENTE DE FREQUÊNCIAS ÓPTICAS EM VIDROS FLUOROINDATOS DOPADOS COM ÉRPIO

G. S. Maciel<sup>a)</sup>, Cid B. de Araújo<sup>a)</sup>, Y. Messaddeq<sup>b)</sup>, A. Florez<sup>c)</sup> e M. A. Aegerter<sup>d)</sup>

a) Departamento de Física-UFPE; b) Instituto de Química-UNESP;

c) Universidade Industrial de Santander-Colômbia; d) Institut für neue Materialien-Alemanha

*Palavras-Chave:* conversão ascendente, fluoroindato, érbio

O estudo das propriedades ópticas de vidros fluoratos dopados com íons de terras-raras tem sido muito intenso devido às possibilidades de uso destes materiais na operação de lasers por conversão ascendente de frequência (CAF), amplificadores ópticos, chaves fotônicas, etc. Os vidros fluoroindatos apresentam várias características vantajosas em relação a outros vidros fluoratos de metais pesados tais como uma ampla janela de transparência (0.2  $\mu\text{m}$  a 8  $\mu\text{m}$ ), resistência à umidade, e fônons com energia  $<507\text{ cm}^{-1}$ . Recentemente mostramos que quando dopados com  $\text{Er}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$  e  $\text{Pr}^{3+}$ , os vidros fluoroindatos apresentam uma grande eficiência para CAF do infravermelho para a região do visível [1] e do amarelo para a região do azul [2,3]. Neste trabalho apresentamos novos estudos do processo de CAF em vidros dopados com  $\text{Er}^{3+}$  usando como fonte de excitação um laser de diodo de baixa potência em 1.48  $\mu\text{m}$ . Estes resultados estendem os obtidos à temperatura ambiente [1] para toda a faixa de 24 a 433 K. O espectro de CAF obtido mostra emissões devido às transições  ${}^2\text{H}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (407 nm);  ${}^2\text{H}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (530 nm);  ${}^4\text{S}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (550 nm);  ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (670 nm);  ${}^4\text{I}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (808 e 827 nm);  ${}^4\text{S}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{13/2}$  (854 nm) e  ${}^4\text{I}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  (980 nm). O estudo da dependência das intensidades emitidas em função da potência do laser incidente, a evolução temporal do sinal e a dependência destes comportamentos com a temperatura das amostras permitiu descrever microscopicamente as várias rotas de transferência de energia entre átomos, responsáveis pelas emissões observadas.

1. de Araújo et al.; Appl. Phys. Lett. 68, 602 (1996)

2. Menezes et al.; J. Non-Crystall. Solids- submetido

3. de Araújo et al.; Phys. Rev. B 50, 16219 (1994)

## CONVERSÃO ASCENDENTE DE FREQUÊNCIAS NO REGIME CONTÍNUO EM VIDROS FLUOROINDATOS DOPADOS COM NEODÍMIO

Leonardo de S. Menezes, Glauco S. Maciel, Cid B. de Araújo

Departamento de Física - UFPE

Y. Messaddeq

Instituto de Química - UNESP

M. A. Aegerter

Institut für neue Materialien im Stadtwald - BRD

*Palavras-chave:* CAF, fluoroindato, terra-rara

Ultimamente, vários estudos sobre conversão ascendente de frequências (CAF) em vidros fluoroindatos dopados com íons de terras-raras têm sido realizados por suas possibilidades de serem utilizados como contadores quânticos para infravermelho e como meio de ganho em lasers e amplificadores ópticos operando na região de pequenos comprimentos de onda do espectro visível e/ou na região ultravioleta. A matriz fluoroindata é atraente por possuir fônons cujas energias não passam de  $500\text{ cm}^{-1}$ , diminuindo as taxas de decaimento não radiativo e favorecendo inversão de população. Além disso, a boa estabilidade físico-química destes vidros é fator importante para aplicações. A CAF em vidros fluoroindatos foi estudada anteriormente em amostras dopadas com  $\text{Pr}^{3+}$  [1] e  $\text{Er}^{3+}$  [2]. Neste trabalho, mostramos resultados espectroscópicos de várias amostras com diferentes concentrações de  $\text{Nd}^{3+}$ , excitadas por um laser de Ti:Safira contínuo, com potência de 200 mW, sintonizado na transição  ${}^4\text{I}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{3/2}$  do  $\text{Nd}^{3+}$  (865 nm). Observou-se um rico espectro de CAF, recheado de linhas cujas origens puderam ser identificadas. Duas séries de experimentos foram feitas para determinar os mecanismos responsáveis pela geração de cada linha: na primeira, aferimos a dependência dos sinais com a intensidade do laser incidente e, na segunda, observamos as evoluções temporais dos sinais de CAF. Os resultados foram analisados considerando processos de transferência de energia e relaxação cruzada em pares de íons de  $\text{Nd}^{3+}$ .

[1]. De Araújo et al, Phys. Rev. B 50, 16219 (1994).

[2]. De Araújo et al, Appl. Phys. Lett. 68, 602 (1996).

## SEQUÊNCIA DE TRANSIÇÕES DE FASE NO CRISTAL $\text{Li}_3\text{ThF}_7$

M. A. S. Oliveira\*, J.-Y. Gesland<sup>#</sup>, M. A. Pimenta\* e R. L. Moreira.\*

\* Departamento de Física, ICEX, UFMG, C.P. 702, 30161.970 Belo Horizonte, MG, Brasil

<sup>#</sup> Université du Maine, Cristallogénese, 72017 Le Mans, França

**Palavras Chave:** calorimetria, condutividade iônica, transição de fase

Cristais de  $\text{Li}_3\text{ThF}_7$  possuem alto interesse tecnológico como monocromadores de raios-X na região de 6.5 Å. Este material foi inicialmente sintetizado no final dos anos cinquenta. Desde então, sua estrutura cristalina a temperatura ambiente tem gerado várias controvérsias. Inicialmente foram-lhe propostas estruturas tetragonais pertencendo aos grupos  $P4/nmm$ ,  $P4/n$  ou ainda  $P4/ncc$ . Somente no final da década passada, utilizando difração de raios-X e de neutrons, foi determinada a estrutura ortorrômbica atualmente aceita, pertencendo ao grupo  $Ccca$ . No início dos anos noventa, foi observada uma transição de fase para o grupo tetragonal  $P4/ncc$ , entre 22 e 75°C, posteriormente confirmada por medidas em DTA como acontecendo a 68°C. Devido à falta de estudos sistemáticos acerca desta transição, iniciamos investigações cuidadosas com várias técnicas em uma ampla faixa de temperatura. Nossos monocristais foram elaborados utilizando a técnica de Czochralski (fusão congruente a 570°C). Neste trabalho apresentaremos os resultados nossas investigações térmicas e dielétricas entre -173 e 540°C. As análises térmicas foram feitas utilizando um DSC 30 Mettler, com taxas de aquecimento e resfriamento de 10°C/min sob atmosfera de nitrogênio. Medidas dielétricas foram feitas utilizando seja um criostato, seja um forno, também sob atmosfera de nitrogênio e a 1°C/min. Foram detectados três saltos de entalpia nas medidas calorimétricas por volta de 9, 96 e 196°C, sem histerese térmica aparente, coincidentes com anomalias observadas em condutividade elétrica e em constante dielétrica do cristal. Estes dados mostram claramente a existência de três transições de fase de primeira ordem ocorrendo naquelas temperaturas. Observamos também uma grande variação destas últimas grandezas (várias ordens de grandeza) mostrando o caráter de condutor iônico da fase de alta temperatura do cristal. Concluímos então, a presença de duas novas transições de fase (9 e 196°C) e a confirmação da transição anteriormente relatada, porém a uma temperatura diferente: 96°C.

## ESTUDO RAMAN DA TRANSIÇÃO DE FASE INCOMENSURÁVEL DO CRISTAL $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$

A.J.Vasconcelos, C.B.Pinheiro, N.L.Speziali, M.A.Pimenta

Departamento de Física - U.F.M.G.

**Palavras-Chave:** transições de fase incomensurável, espectroscopia Raman

O  $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$  é um cristal da família  $A_2BX_4$  que apresenta várias fases estruturalmente distintas durante o resfriamento. Na fase de temperatura ambiente, o  $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$  tem estrutura isomorfa ao  $\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$ , que apresenta grupo de espaço  $Pnma$  ( $D_{2h}^{16}$ ). A  $T_i = 245\text{K}$  ocorre uma transição de fase incomensurável. Os tetraedros  $\text{HgBr}_4$  sofrem uma pequena torção gerando uma modulação, cujo vetor possui um valor constante igual a  $q = 0,165(2)a_1^*$ . A  $T_c = 232\text{K}$  ocorre uma transição de fase de primeira ordem (lock-in), levando o cristal a uma fase comensurável geminada, sem mudança na periodicidade da rede, descrita pelo grupo de espaço  $P2_1/n$  ( $C_{2h}^5$ ). Neste trabalho, o cristal de  $\text{Cs}_2\text{HgBr}_4$  foi estudado usando a técnica de Espectroscopia Raman, entre 215 e 293K, em diferentes geometrias de espalhamento. Foi feito um estudo por teoria de grupo das simetrias dos fonons ópticos presentes em cada fase estrutural do composto e, a partir daí, determinadas as regras de seleção para o espalhamento Raman. Os espectros experimentais foram obtidos na região de 25 a 250  $\text{cm}^{-1}$ , e ajustados através da soma de laurentzianas. O número de modos observados foi sempre inferior àquele previsto pela teoria de grupo. Acompanhamos o comportamento das posições e larguras dos modos em função da temperatura. O efeito da incomensurabilidade sobre os espectros não se apresentou evidente. Os modos internos não sofrem qualquer alteração nesta transição. Já a lock-in é bem caracterizada pelo aparecimento do modo respiratório, antes ausente em certas simetrias de espalhamento, como previsto pela teoria de grupo.

## TRANSIÇÃO DE FASE INDUZIDA POR PRESSÃO HIDROSTÁTICA EM CRISTAIS DE $\text{LiNaSO}_4$

P.T.C.Freire\*, O.Pilla<sup>†</sup>, V.Lemos<sup>\*\*</sup>, F.E.A.Melo\*, J. Mendes Filho\*

\* Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

<sup>†</sup> Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trento, Italia

<sup>\*\*</sup> Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas

**Palavras-Chaves:** transição de fase, Raman, pressão hidrostática

É conhecido que o  $\text{LiNaSO}_4$  apresenta uma transição de fase a alta temperatura com a nova fase sendo caracterizada por uma alta condutividade iônica. O  $\text{LiNaSO}_4$  cristaliza-se no grupo espacial ( $C_{3v}^4$ ) P31c com seis moléculas por célula unitária. Os seis íons de lítio e os seis íons de sódio ocupam sítios de simetria  $C_1$  enquanto que os seis íons de sulfato ocupam três sítios de simetria  $C_3$  não equivalentes. As representações irredutíveis dos modos internos são dadas por  $\Gamma = 9A_1 + 9A_2 + 18E$ , com  $A_1$  e  $E$  sendo ativos no Raman e no infravermelho. Fazendo um estudo de espalhamento Raman à temperatura ambiente em função da pressão hidrostática com uma célula de pressão a extremos de diamante descobrimos uma transição de fase que ocorre em aproximadamente 2,2 GPa quando a pressão é aumentada e em aproximadamente 1,9 GPa quando a pressão é abaixada. Mostramos este fato através das mudanças observadas no espectro Raman para a região dos modos de estiramento simétrico  $\nu_1$  do sulfato, que são os mais intensos modos ativos do material. Observamos que o número de modos  $\nu_1$  do  $\text{SO}_4$  que estão centrados à pressão atmosférica em 974  $\text{cm}^{-1}$ , 998  $\text{cm}^{-1}$  e 1026  $\text{cm}^{-1}$ , acima da pressão de transição passa a ser apenas dois. Como interpretação deste resultado dizemos que os íons do sulfato deixam os três sítios de simetria  $C_1$  e passam a ocupar dois sítios de simetria  $C_3$ . Destacamos que esta configuração é exatamente a que ocorre com o sulfato de lítio e sódio hexahidratado, onde os doze íons do sulfato nas condições normais de temperatura e pressão ocupam exatamente dois sítios de simetria  $C_3$  não equivalentes.

## INSERÇÃO DE MOLÉCULAS DE ÁGUA NO PIROCLORO DE DEFEITO $\text{NH}_4\text{NbWO}_6$ SOB ALTAS PRESSÕES

Cláudio A. Perottoni e João Alziro H. da Jornada

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

**Palavras-Chave:** pirocloro, inserção, altas pressões

Os compostos com estrutura de pirocloro  $A_2B_2X_6X'$  apresentam toda uma série de propriedades físicas interessantes, incluindo ferroeletricidade, ferromagnetismo e condutividade iônica. Apesar disso, o comportamento desta classe de compostos sob altas pressões e, particularmente, dos pirocloros de defeito  $\text{AB}_2\text{X}_6$ , é pouco conhecido. A estrutura aberta destes compostos sugere a possibilidade de transições de fase em altas pressões, como evidenciado recentemente. No presente trabalho, foi estudado o comportamento do composto  $\text{NH}_4\text{NbWO}_6$  em alta pressão, sob diferentes meios hidrostáticos. Os experimentos de difração de raios X por dispersão em energia e espectroscopia Raman foram realizados com auxílio de uma câmara de bigornas de diamantes (DAC). A amostra e o calibrante de pressão (rubi) são acondicionados no interior de um orifício de 300  $\mu\text{m}$  de diâmetro em uma gaxeta metálica, junto com um meio transmissor de pressão, usualmente uma mistura de metanol-etanol-água (16:3:1, em volume). A amostra de  $\text{NH}_4\text{NbWO}_6$  foi preparada na Technischen Fakultät, Universität Erlangen-Nürnberg (Alemanha). Os resultados de difração de raios X em alta pressão indicam um súbito aumento do volume da cela unitária desse composto entre 2 e 3 GPa. Esse efeito, reversível, é tanto maior quanto maior a proporção de água contida no meio transmissor de pressão. No caso extremo observado até o momento, o volume da cela unitária a 3,5 GPa atingiu um valor 3 % superior ao volume à pressão ambiente. O mecanismo proposto para a explicação deste fenômeno consiste na entrada de moléculas de água no interior das cavidades formadas pelo arranjo tridimensional dos octaedros de  $(\text{Nb,W})\text{O}_6$ , com a conseqüente expansão da cela unitária, efeito similar ao observado, à pressão ambiente, em pirocloros de defeito higroscópicos, tais como  $\text{KNbWO}_6$ . Observou-se também um considerável aumento na frequência de vibração do modo de *bending*  $\nu_2$  do íon amônio, decorrente da interação destes íons com as moléculas de água intersticiais.

(CNPq, FINEP, FAPERGS)

## EXCHANGE-CORRELATION EFFECTS IN THE HOLE BAND STRUCTURE OF GaAs p-type $\delta$ -DOPING QUANTUM WELLS AND SUPERLATTICES

R. Enderlein, G.M. Sipahi, L.M.R. Scolfaro, and J.R. Leite  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo, DFMT,  
C.P. 66318, 05389-970 São Paulo, SP

*Palavras-Chave: delta-doping, hole band structure, exchange-correlation*

The hole gases of p-type  $\delta$ -doping quantum wells (QW's) and superlattices (SL's) are of extremely high densities owing, first, to the high sheet dopant concentrations (in the range of  $10^{13}\text{cm}^{-2}$ ) and, second, to the strong localization of heavy holes. This causes, on the one hand, strong screening of the ionized dopants, resulting in relatively flat electrostatic potential wells. On the other hand, strong exchange-correlation effects are expected in the electronic structure of p-type  $\delta$ -doping systems. In the present paper, p-type  $\delta$ -doping QW's and SL's in GaAs are studied in the vicinity of the  $\Gamma_8$  valence band maximum. The calculations rely on a plane wave expansion of the Luttinger-Kohn multiband effective mass equation. Exchange-correlation effects are taken into account in a more rigorous way than this has been done thus far in dealing with the anisotropic multi-component hole gas of the  $\Gamma_8$  valence band. The method is used to calculate self-consistent potential profiles, subband and miniband structures as well as Fermi level positions for a series of p-type  $\delta$ -doping QW's and SL's. Only if exchange-correlation effects are properly taken into account reasonable agreement with experimental photoluminescence data can be achieved. In particular, the experimentally observed large energy separation between the heavy and light hole ground states turns out to be mainly an exchange-correlation effect. For comparison, potentials and energy levels are also calculated for electrons of n-type  $\delta$ -doping systems. In this case the potential wells are considerably deeper and wider, and exchange-correlation effects are less pronounced. The implications of these differences for luminescence spectra from n- and p-type  $\delta$ -doping structures are discussed.

## TRANSIÇÃO METAL-ISOLANTE INDUZIDA POR LUZ EM UM SISTEMA 2D

S.M. de Medeiros, P.S.S. Guimarães, J.F.Sampaio, A.G. de Oliveira, M.V.B. Moreira  
Dept. Física, Universidade Federal de Minas Gerais, CP.702, 30161 970 Belo Horizonte, MG

*Palavras-Chave: metal-isolante, hopping, dopagem planar*

Este trabalho descreve um estudo do fenômeno de transição metal-isolante em GaAs com dopagem planar. Observamos uma mudança do regime de transporte elétrico, de condução por saltos ("hopping") para condução metálica, em uma única amostra de GaAs com apenas uma camada dopada com Si. Essa transição é induzida por iluminação com radiação de energia menor que a faixa proibida do GaAs.

A amostra, preparada por Epitaxia por Feixe Molecular de maneira padrão, consiste em uma única camada de impurezas de silício a uma concentração nominal de  $1 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$  incorporadas em um filme de GaAs. As propriedades de transporte elétrico na direção paralela ao plano de impurezas foram investigadas através de medidas de magnetotransporte em temperaturas entre 10 K e 0,3 K. A resistência elétrica da amostra esfriada no escuro mostra o comportamento termicamente ativado característico do regime de condução por saltos de alcance variável. Além disso, sua magnetoresistência exibe a variação não-monotônica típica do regime de condução por saltos e a tensão Hall não é linear no campo magnético, conforme esperado para este regime de condução. Após iluminação com radiação de energia 1,35 eV em temperaturas abaixo de 10 K, as propriedades elétricas da amostra apresentam mudanças significativas que tornam-se gradualmente mais pronunciadas a medida que a dose de luz é aumentada: o comportamento termicamente ativado da resistência desaparece gradativamente até que esta se torna independente da temperatura para doses de luz suficientemente altas; a variação da resistência com o campo magnético muda de forma e na saturação a magnetoresistência negativa em campos baixos se ajusta muito bem à teoria de localização fraca; a tensão Hall se torna linear e a concentração de portadores dela obtida aumenta com a iluminação até saturar em  $0,8 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ .

Concluímos que GaAs com dopagem planar de Si em baixas concentrações é um excelente sistema para estudar a transição metal-isolante em duas dimensões. A utilização de uma única amostra evita problemas com condições de crescimento diferentes.

(FAPEMIG, CAPES, CNPq)

## TRANSFERÊNCIA $\Gamma$ - $X_2$ EM SUPER-REDES TIPO II DE GaAs/AlAs

Gerald Weber\* e Ana M. de Paula<sup>†</sup>

\*Instituto de Pesquisa (IPPEX), Universidade São Francisco

<sup>†</sup>Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas

*Palavras-Chave:* super-redes tipo II, interação elétron-fônon, dinâmica de portadores

Dinâmica de portadores em semicondutores tem atraído muita atenção nos últimos anos devido à sua importância tanto em física de dispositivos como para física básica. O relaxamento de energia de portadores quentes em poços quânticos e super-redes do tipo I já se encontra bem compreendido. No entanto, a dinâmica de portadores de super-redes tipo II, em especial GaAs/AlAs, ainda precisa de um aprofundamento maior. Em super-redes de AlGaAs-AlAs os estados  $\Gamma$  de AlGaAs podem estar mais altos em energia do que os estados  $X$  de AlAs através de uma escolha apropriada da concentração de Al e das larguras das camadas. Desta maneira a super-rede torna-se indireta em espaço real, ou seja torna-se uma super-rede do tipo II. Nós calculamos os tempos de transferência  $\Gamma \rightarrow X_2$  devido a emissão e absorção de fônons ópticos para super-redes de GaAs-AlAs e AlGaAs-AlAs (tipo II), extendendo cálculos anteriores [A. M. de Paula and G. Weber, Appl. Phys. Lett. **65**, 1281 (1994)] ao incluir fônons de interface e mecanismos de absorção de fônons. Para a descrição da interação elétron-fônon (interação Fröhlich) usamos o modelo de continuidade dielétrica e as funções eletrônicas são calculadas por um modelo Kronig-Penney. Usamos ainda um conjunto de massas efetivas para o vale  $X$  do AlAs medido por ressonância ciclotrônica [M. Goiran *et al.*, Physica B **177**, 465 (1992)] e, a exemplo do caso de doadores em poços tipo II [G. Weber, Appl. Phys. Lett. **67**, 1447 (1995)], obtemos uma concordância melhor com os resultados experimentais.

## ELECTRON AND HOLE STATES IN LEAD-SALT SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS

Erasmio A. de Andrada e Silva

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE  
Laboratório Associado de Sensores e Materiais - LAS  
CP 515 - São José dos Campos - SP - erasmio@las.inpe.br

*Palavras-Chave:* lead-salt quantum well, valley splitting, spin-orbit interaction

The envelope function theory for the stationary states for electrons and holes confined in lead-salt (PbTe, PbSe and PbS) semiconductor quantum wells is developed. The lead-salt are narrow-gap semiconductors with direct gap at the four equivalent L points of the Brillouin zone and have been used in different electronic devices. Improvements in their MBE growth permits now the study of new and with better quality heterostructures. In this work we start from the four-band kp model around the L point, first used by Dimmock, and obtain matching conditions for the envelope functions at the interface between different compounds, that depend both on the specific valley and on the spin of the particles. It is shown that the absence of specular symmetry in asymmetric quantum wells breaks both the valley and the spin degeneracy of the valence and conduction subbands. The method is applied in the calculation of the energy dispersion relation for electrons and holes in  $Pb_{1-x}Eu_xTe/Pb_{1-y}Eu_yTe$  ( $x \neq y$ ) asymmetric quantum wells grown along the  $\{111\}$  direction. The valley and spin-orbit splittings obtained for the ground state are shown as a functions of the well width and of the degree of asymmetry of the well. The splittings in the higher states derived from other valleys are also investigated.

(CNPq)

## ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURES OF THE GaN (100, 110, 111) SURFACES

*J.L.A. Alves, H.W.L. Alves, C. Oliveira, R.D.S.C. Valadão*

DCNAT, FUNREI

CP 110, 36300-000 São João del Rei, MG

and

*J.R. Leite*

IFUSP, DFMT

C.P. 66318, 05389-970 São Paulo, SP

*Palavras-Chave: electronic structure, surface, GaN*

At present there is little detailed understanding of the microscopic structure of the GaN surfaces, in particular of the GaN/SiC (100) interface which is of special interest. The aim of the present work is to contribute for a better understanding of the GaN surfaces on the basis of local valence considerations and to suggest new experiments and calculations. We have studied the reconstruction of the (110), (100) and (111) surfaces of GaN by applying "ab initio" quantum methods (Gaussian code) to small clusters representative of these surfaces. In modelling the GaN surfaces and GaN/SiC interface we have used the following clusters: surface (100): Ga<sub>2</sub>NH<sub>4</sub>, Ga<sub>2</sub>N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, Ga<sub>2</sub>SiH<sub>4</sub>, Ga<sub>2</sub>CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>SiH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>CH<sub>4</sub>, GaSi<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, GaC<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, NSi<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, NC<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, Ga<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, Ga<sub>2</sub>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, N<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, N<sub>2</sub>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>; surface (110): GaNH<sub>4</sub>, GaN<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, Ga<sub>2</sub>NH<sub>5</sub>, Ga<sub>2</sub>N<sub>2</sub>H<sub>6</sub>; surface (111): GaN<sub>3</sub>H<sub>9</sub>, Ga<sub>3</sub>NH<sub>9</sub>, Ga<sub>2</sub>N<sub>6</sub>H<sub>18</sub>, Ga<sub>6</sub>N<sub>2</sub>H<sub>18</sub>. The results are compared to experiments and previous theoretical calculations.

We conclude that the surface reconstructions are determined by local rehybridization or valence effects and are basically independent of energy band features.

## ESTUDOS "AB INITIO" DE VACÂNCIAS DE AD-ÁTOMOS EM Si(111)-(7x7)

*R. B. Capaz (1), K. Cho (1), H. Lim (2), e J. D. Joannopoulos (1)*

(1) Physics Department, Massachusetts Institute of Technology, EUA

(2) Physics Department, Kyung Hee University, Coréia do Sul

*Palavras-Chave: silício, superfícies, vacâncias*

Si(111) é a superfície de clivagem natural em cristais de silício e sua estrutura tem sido estudada de maneira extensa, tanto teórica como experimentalmente. A reconstrução de mais baixa energia para esta superfície tem simetria (7x7), e o modelo mais aceito para descrevê-la é o chamado modelo de Takayanagi DAS ("dimer-adatom-stacking-fault"). Devido ao tamanho e à complexidade desta reconstrução, apenas recentemente tem sido possível a realização de cálculos de primeiros princípios ("ab initio") para investigar suas propriedades. Neste trabalho iremos descrever cálculos "ab initio" das propriedades de vacâncias de ad-átomos em Si(111)-(7x7). Nossos cálculos são fundamentados nas aproximações de funcional densidade local (LDA), pseudopotencial e super-célula. Cálculos complementares na aproximação "tight-binding" são usados para relaxações de longo alcance. Resultados obtidos mostram que a energia de formação de vacâncias é de 0.9 eV em média, com variações de 0.1 eV dependendo do tipo de ad-átomo. Estas variações mostram que ad-átomos "de canto" podem ser removidos mais facilmente do que ad-átomos "de borda", e ad-átomos na metade "falhada" da célula unitária podem ser mais facilmente removidos do que ad-átomos na metade "não-falhada". Nossos resultados estão em desacordo com resultados experimentais, que sugerem uma energia de formação média de 0.4 eV. Mudanças na estrutura eletrônica dos estados de superfície na vizinhança do nível de Fermi são preditas e explicadas como sendo induzidas por relaxações estruturais ocorridas a partir da remoção dos ad-átomos. Estas mudanças podem ser observadas em experimentos de microscopia eletrônica de tunelamento (STM) diferencial. Simulações teóricas das imagens de STM serão apresentadas.

## FORMAÇÃO DE DÍMEROS E ESTABILIDADE DAS SUPERFÍCIES RECONSTRUÍDAS GaAs:Te e InAs:Te

*R. Claudino da Silva e A. C. Ferraz*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* adsorção, estabilidade, superfícies

Estudamos a estabilidade da adsorção de Te em superfícies de GaAs(001) e InAs(001) com reconstruções  $2 \times 2$ , para as concentrações  $\theta_{Te} = 0, 1/4, 1/2, 3/4$  e 1. Realizamos cálculos de energia total dentro do formalismo do Funcional Densidade empregando pseudopotenciais de norma conservada. Para a relaxação das estruturas empregamos a dinâmica molecular de Car e Parrinello. Construímos a super-célula  $2 \times 2$  segundo o "Repeated - Slab Method": seis camadas inter-atômicas de GaAs (InAs) crescidas ao longo da direção (001) mais uma camada de cobertura de Te nas concentrações indicadas em uma das extremidades e uma região de vácuo equivalente a seis camadas inter-atômicas. Nossos resultados apontam para uma redução na estabilidade das superfícies na proporção em que aumenta a concentração de Te na superfície. A cobertura de As ( $\theta_{Te} = 0$ ) é energeticamente mais favorável que as recobertas com qualquer concentração de Te, tanto na GaAs(001) quanto na InAs(001). Observou-se ainda que nas superfícies com  $\theta_{Te} = 0$  e  $\theta_{Te} = 1$ , os átomos de As dimerizam da ordem de 32% a mais que os de Te. Comparando as dimerizações do Te nas duas superfícies, concentrações  $\theta_{Te} \geq 1/2$ , observamos que é cerca de 40% maior sobre a InAs(001) (célula terminada em In) que sobre a GaAs(001) (terminada em Ga). Outra tendência verificada, é a flutuação do Te sobre as superfícies: eleva-se de 0.19 u.a. na  $\theta_{Te} = 1/4$  para 0.47 u.a. na  $\theta_{Te} = 1$ . Analisando as energias de adsorção nas duas superfícies encontramos para as concentrações  $\theta_{Te} = 0$  e  $\theta_{Te} = 1/4$  uma adsorção mais favorável sobre o GaAs, por outro lado para  $\theta_{Te} \geq 1/2$  a adsorção sobre o InAs é mais favorável que sobre o GaAs. Verificamos ainda uma pequena interação entre cadeias ao longo da direção (-110) para  $\theta_{Te} \geq 3/4$ . Nossos resultados apresentam grande concordância com observações experimentais recentes e simulações teóricas sobre a ação surfactante do Te no crescimento epitaxial de InAs(001) sobre GaAs(001).

## EFEITOS ÓTICOS DA DIFUSÃO ATÔMICA EM HETEROESTRUTURAS

*Belita Koiller<sup>a</sup>, A.S. Martins<sup>a</sup> e H. Chacham<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Instituto de Física, UFRJ Cx. Postal 68.528, Rio de Janeiro, 21945-970

<sup>b</sup> Departamento de Física, ICEX, UFMG, Cx. Postal 702, Belo Horizonte 30161-970

Técnicas experimentais modernas permitem a determinação direta de perfis de composição química com resolução atômica. O uso destes métodos, em conjunto com medidas de transporte e óticas, permite estabelecer correlações quantitativas entre o perfil de composição química de uma amostra e suas propriedades opto-eletrônicas. Uma questão relevante relacionada a perfis de composição é o efeito de interdifusão atômica em heterojunções, que destrói a definição das interfaces. Investigamos o efeito da difusão cruzada Al-Ga nas propriedades óticas de poços quânticos e super-redes de AlAs/GaAs. Nosso modelo incorpora uma descrição realista da estrutura em escala atômica em toda a amostra. A liga inhomogênea presente na região de difusão é tratada microscopicamente na aproximação *tight-binding* como proposto anteriormente para ligas homogêneas (B. Koiller and R. B. Capaz, *Phys. Rev. Lett.* 74, 769, 1995). *Ensembles* de super-células são utilizados para simular as estruturas. Os perfis de difusão são obtidos de dados experimentais de TEM de alta resolução (C. Kisielowsky, *Braz. Jour. Phys.*, no prelo). Calculamos propriedades óticas no limiar de absorção para várias heteroestruturas. Nossos resultados para estruturas de *gap* direto demonstram que o aumento do comprimento de difusão em geral leva a uma transição para um comportamento de *gap* indireto. Por outro lado, encontramos super-redes de período curto para as quais a interdifusão induz uma transição de comportamento indireto para direto. Correlações entre a força de oscilador de transições óticas e os perfis de difusão indicam que as propriedades óticas de heteroestruturas são ferramentas confiáveis para a determinação indireta de perfis de composição.

( CNPq, FINEP, FAPEMIG )

## MOLECULAR SWITCHES NONLINEAR EXCITATIONS

*Geraldo Magela e Silva*

Department of Physics, University of Brasilia,  
70.910-900 Brasilia, DF - BRAZIL

*Palavras-Chave: molecular switch, polyacetylene, soliton dynamics*

The charge transfer on a single polyacetylene chain is studied with impurities and added molecules working as switches. The chain is modeled by a Su-Schrieffer-Heeger (SSH) type Hamiltonian extended to include the effects of an external electric field and the parameters of the switching molecules. The equations of motion of the system are numerically integrated and the time evolution of the charge on the chain is analyzed. The charge transfer through the sites that work like a switch is considered. Two basic types of molecular switches are studied: pair of donor-acceptor molecules embedded in the polymer chain, and bonded to the chain. The main differences between these two models of switches are determined. The influence of the parameters of the molecules (site energy and bond strength) on the charge transfer as well as the changes they must undergo to characterize the molecular switch are determined. The role of the length of separation between the sites where the donor and acceptor molecules bond at is clarified.

(CNPq)

## ESTUDO DE DEFEITOS NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DA CADEIA DE TRANSPOLIACETILENO, COM INCLUSÃO DE CORRELAÇÃO ELETRÔNICA

*Gustavo Edward de Muelenaere Corrêa*  
Departamento de Física - UnB

*Marília Junqueira Caldas*  
Instituto de Física - USP

*Palavras-Chave: defeitos, polímeros, correlação eletrônica*

A cadeia de poliacetileno tem sido frequentemente estudada ora como cadeia infinita dentro da periodicidade de Bloch, ora como cadeia finita. Ambas essas abordagens possuem limitações difíceis de se contornar: a cadeia infinita periódica apresenta-se como uma idealização da cadeia real desordenada, e o estudo de cadeias finitas dificilmente alcança em ordem de grandeza o número típico de átomos das cadeias reais ( $N=10^4$ ). A inclusão de efeitos de correlação eletrônica também fica comprometida para ambos os casos: é claramente inviável no caso da cadeia infinita, devido ao número de orbitais (infinito) a serem considerados, e por hora computacionalmente proibitiva para cadeias finitas que se aproximem das cadeias reais. Recentemente foi proposto um método alternativo que permite o tratamento exato de cadeias infinitas no espaço real, ou seja, sem a necessidade de invocar a periodicidade de Bloch. Baseado no formalismo das funções de Green e na técnica da matriz transferência (para sistemas unidimensionais), ele pode ser acoplado a qualquer método Hartree-Fock; no nosso caso trabalhamos dentro da aproximação semi-empírica PPP. Este método foi estendido neste trabalho para tratar também de defeitos conformacionais (sólitons) na estrutura do transpoliacetileno, além de se incluir efeitos de correlação eletrônica, mediante full CI. Tal implementação foi feita de forma indireta, sobre a hamiltoniana efetiva (numérica) de um cluster finito que represente satisfatoriamente as propriedades físicas da cadeia infinita. Como aproximação dentro do full CI desprezamos as configurações com energia superior a quatro vezes o valor do gap. Comparando as grandezas físicas calculadas com os valores experimentais podemos concluir que o método apresentou resultados satisfatórios, e que está apto a ser empregado no estudo de outras cadeias orgânicas. Como exemplo, o gap para a cadeia pura, calculado em 3.5 eV, caiu para 1.6 eV depois da inclusão do CI.

(FAPESP, CnPq)

## PROCESSOS ÓPTICOS NÃO-LINEARES DE TERCEIRA ORDEM EM POLI(3-HEXADECIL)TIOFENO

*L. Demenicis, A. S. L. Gomes, D. V. Petrov, Cid B. de Araújo, C. P. de Melo, C. G. Santos*  
Departamento de Física-Universidade Federal de Pernambuco  
*R. Souto-Maior*

Departamento de Química Fundamental-Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-Chave:* óptica não-linear, Z-scan, polímeros

Polímeros orgânicos de natureza conjugada vêm sendo apontados como materiais extremamente promissores para o desenvolvimento de dispositivos fotônicos. Tais materiais apresentam resposta óptica não-linear intensa e rápida e são flexíveis quanto ao modo de preparação, podendo ser obtidos sob forma de filmes e fibras. Foram estudadas as propriedades ópticas não-lineares do polímero conjugado poli(3-hexadecil)tiofeno (PT16) dissolvido em clorofórmio. As amostras de PT16 foram sintetizadas quimicamente a partir do monômero correspondente e utilizando cloreto férrico como oxidante. A partir do estudo das propriedades ópticas não-lineares como função da concentração de polímero e da intensidade luminosa foram obtidos os valores das partes real e imaginária da susceptibilidade não-linear para as diversas soluções. Esta caracterização foi realizada com a técnica de Z-scan, utilizando como fonte de bombeamento pulsos de 100ps. Os resultados mostraram um comportamento de saturação do valor de  $\Delta T$ , diferença entre os valores máximos e mínimos da transmissão, como função da intensidade de excitação, indicando que efeitos de ordem superior são significativos. Foi obtida, também, a componente não-diagonal da susceptibilidade utilizando-se uma técnica de Z-scan modificada. Nesta técnica dois feixes estão presentes, um de excitação e outro de prova, ambos no mesmo comprimento de onda, polarizados ortogonalmente e ajustados temporalmente um em relação ao outro. A curva de Z-scan associada ao feixe de prova é obtida como função do retardo temporal. Os resultados idênticos tempos de resposta inferiores a duração do pulso do feixe de excitação, demonstrando rápida resposta temporal para estes materiais (subpicosegundos).

## FABRICAÇÃO DE DISPOSITIVOS EMISSORES DE LUZ UTILIZANDO-SE A TÉCNICA DE AUTO-MONTAGEM DE FILMES FINOS POLIMÉRICOS

*M. Ferreira, O. Onitsuka, A. C. Fou, B. Hsieh\*, M.F. Rubner*

Department Of Materials Science And Engineering, Massachusetts Institute of Technology, EUA  
\*Xerox Corp., Webster Research Center, Webster, EUA

*Palavras-Chave:* poli(p-fenileno vinileno), diodos emissores de luz, dispositivos orgânicos.

Filmes poliméricos ultra-finos de poli(p-fenileno vinileno) (PPV) foram utilizados para a fabricação de dispositivos orgânicos emissores de luz (OLEDs). Os filmes foram construídos pela técnica de adsorção espontânea de camadas baseada na atração eletrostática de um polícatión precursor do PPV alternado com diferentes poliânions (ácido polimetacrílico (PMA) e poliestireno sulfonado (SPS)). Observou-se que a natureza do poliânion pode alterar drasticamente as características finais do PPV como comprimento de onda de absorção (UV-vis) e emissão (PL), bem como as características de transporte de carga. Para melhor entender o comportamento dos dispositivos contendo as formas modificadas de PPV construiu-se inicialmente OLEDs contendo diferentes números de bicamadas de PPV/PMA e PPV/SPS utilizando-se ITO e Al como eletrodos. A espessura da camada emissora foi variada entre 80Å até 1500Å. A intensidade de luz emitida para dispositivos de  $4\text{mm}^2$  foi de aproximadamente 100nW para os filmes PPV/PMA e próximo a 20nW para PPV/SPS. Heteroestruturas compostas de blocos de PPV/SPS e PPV/PMA combinados num mesmo dispositivo foram então estudadas. Variou-se a espessura dos blocos bem como a posição dos mesmo com relação aos eletrodos. Observou-se que heteroestruturas tipo ITO/((PPV/SPS)<sub>x</sub>/((PPV/PMA)<sub>y</sub>/Al são as mais eficientes gerando luz de intensidade entre 600 - 800 nW para ddp de 8V. A utilização da técnica SA de fabricação de filmes possibilita controlar também o material em contato direto com os eletrodos. Apesar da espessura de uma camada ser da ordem de poucos angstroms, observou-se que o material em contato direto com o eletrodo de alumínio (PPV ou PMA) pode alterar consideravelmente a eficiência do dispositivo. Em geral, quando o material não ativo (PMA) está em contato direto com o eletrodo de Al, o dispositivo tem um aumento na eficiência relativa de 3 a 4 vezes.

## POTENCIAL DE SUPERFÍCIE DE FILMES DE LANGMUIR DE POLIANILINAS

*A. Riul Jr.<sup>1</sup>; S.V. Mello<sup>2</sup>; L.H.C. Mattoso<sup>3</sup>; R. M. Faria<sup>1</sup> e O.N. Oliveira Jr<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Depto. de Física e Ciência dos Materiais, IFSC, USP, CP 369, CEP 13560-970.

<sup>2</sup> Depto. de Físico Química, IQSC, USP, CP 369, CEP 13560-970.

<sup>3</sup> EMBRAPA / CNPDIA, São Carlos, CP 741, CEP 13569-970.

**Palavras-chave** : potencial de superfície, polianilinas, dopagem

A dopagem, através de subfases ácidas, é essencial para a obtenção de filmes de Langmuir estáveis, permitindo a deposição de filmes LB de polianilina (PAni) e de poli(*o*-etoxianilina) (POEA). Verifica-se que a estabilidade da monocamada e a fabricação de filmes LB são melhoradas à medida que subfases com valores de pH mais baixos são utilizadas. Neste trabalho investigou-se a influência da dopagem, através de medidas de potencial de superfície ( $\Delta V$ ), em monocamadas de POEA e PAni. As características dos filmes de Langmuir dependem do tipo de ácido utilizado na subfase e do grau de dopagem. Essa dependência era esperada pois estudos com medidas de ângulo de contato mostraram que a energia de superfície da polianilina dopada difere da do polímero não dopado, e varia com o dopante. Nas medidas de  $\Delta V$ , além das contribuições dipolares das moléculas poliméricas, uma contribuição importante provém da dupla-camada elétrica ( $\Psi_0$ ), formada na interface monocamada/subfase, para filmes ionizados. À medida que os valores de pH são diminuídos, em princípio o polímero fica mais dopado, devido a presença de cargas na subfase; aumentando  $\Psi_0$ . Entretanto, os resultados mostram que  $\Delta V$  tende a diminuir com o aumento da concentração no intervalo de  $10^{-4}$  a  $10^{-1}$  M. Isso ocorre porque provavelmente o polímero já está completamente protonado sobre subfases de  $10^{-4}$  M, e  $\Psi_0$  diminui com a força iônica. É interessante notar que, apesar da complexidade das macromoléculas envolvidas, os resultados podem ser discutidos em termos da teoria de Gouy-Chapmann.

(FAPESP/ CNPq/ FINEP)

## INVESTIGAÇÃO DA ORDEM ESTRUTURAL E ANISOTROPIA EM FILMES DE LANGMUIR-BLODGETT DE POLÍMEROS CONDUTORES

*Alexandro Cardoso Tenório, Francisco Lutz dos Santos e Celso P. de Melo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

**Palavras-Chave**: polipirrol, FTIR, filmes de Langmuir-Blodgett

Recentemente mostramos ser possível a preparação de filmes de Langmuir-Blodgett do poly(5-Acetamido-4,5,6,7-tetrahydro-2H-Indole), pACATI, um polímero conjugado derivado do pirrol, depositados sobre diferentes substratos sólidos. Devido à estrutura do monômero correspondente, em que apenas substituições nas posições  $\alpha$  e  $\beta$  são permitidas, o polímero deve apresentar um menor número de ramificações que outros derivados do pirrol, o que em princípio deve levar a uma maior ordem estrutural e a uma marcante anisotropia em suas propriedades de transporte. Neste trabalho serão apresentados resultados da utilização das técnicas de espectroscopia na região do infravermelho por absorção-reflexão para incidência em ângulo rasante (ARIAR) e por reflexão total atenuada (RTA) para a determinação da ordem estrutural e da orientação relativa das cadeias poliméricas. Por obedecerem diferentes regras de seleção, essas técnicas espectroscópicas permitem determinar a direção preferencial das vibrações de grupos moleculares específicos. As vibrações ativas na região do infravermelho foram inicialmente identificadas no espectro de transmissão de 20 monocamadas de pACATI depositadas em lâminas de silício e em seguida foi analisado o espectro de ARIAR correspondente. O fato de que o pico de absorção em  $727\text{cm}^{-1}$  (associado à torção do anel fora do plano) ser o mais intenso no espectro ARIAR pode ser interpretado como um indicativo que nos filmes de LB os anéis de pirrol substituídos estão essencialmente ancorados de modo paralelo ao substrato. No momento está sendo completada a investigação do espectro de RTA com luz polarizada, enquanto a condutividade elétrica das amostras é medida pela técnica de quatro portas.

(Apoio CNPq, FINEP, FACEPE).

## DINÂMICA DE CADEIAS EM FERROFLUIDOS

Pedro Licinio

Departamento de Física - ICEX - UFMG

**Palavras-Chave** : ferrofluidos; espalhamento de luz; difusão anômala; movimento Browniano.

Ferrofluidos são dispersões líquidas de partículas magnéticas sub-domínio estabilizadas. As interações dipolares são responsáveis pela formação de cadeias flexíveis numa ampla faixa de temperaturas e concentrações. O confinamento do fluxo magnético e a estabilização das partículas, com uma camada de surfactante, torna fraca a interação entre cadeias, exceto nas pontas livres, onde o fluxo magnético é intenso. Assim os ferrofluidos são similares a sistemas poliméricos mesoscópicos. Acompanhamos as flutuações estruturais de equilíbrio das cadeias desordenadas (movimento Browniano) com a técnica de *Espalhamento Dinâmico de Luz* (Correlação de Fótons). Utilizamos uma dispersão aquosa de grãos de magnetita de 7.7 nm de raio na faixa de concentração volumétrica de  $10^{-6}$  a  $10^{-2}$ . Medimos a componente polarizada da intensidade espalhada por um LASER de HeNe, com vetores de onda correspondente à faixa  $q = 2$  a  $30 \mu\text{m}^{-1}$ . Observamos que os correlogramas decaem em várias décadas de tempo, indicando uma dinâmica não trivial. Os correlogramas puderam ser ajustados por uma soma de 2 exponenciais, tendo a componente lenta uma potência  $\alpha$  menor do que 1 no argumento (exponencial esticada):

$$C(t) = \left[ I_1 \exp\left(-\frac{t}{T_1}\right) + I_2 \exp\left(-\left(\frac{t}{T_2}\right)^\alpha\right) \right]^2.$$

Enquanto o decaimento rápido apresenta um escalonamento difusivo normal ( $T_1 \sim q^{2.0 \pm 0.1}$ ), o decaimento lento segue uma lei de escala anômala ( $T_2 \sim q^{2.6 \pm 0.1}$ ) para a amostra estudada. Interpretamos estes resultados como devidos a uma separação de modos entre-cadeias e intra-cadeias. O modo intra-cadeias tem uma difusão anômala, a exemplo de sistemas poliméricos simples (modelos de Rouse e Rouse-Zimm). Testamos a consistência desta interpretação, verificando a relação aproximada  $\alpha = 2/d_w$  onde  $d_w$  é a dimensão do traço Browniano (2.6). Observamos ainda que o escalonamento da intensidade com o vetor de onda fornece uma dimensão fractal para as cadeias da ordem de 1,3.

(FAPEMIG)

## DINÂMICA DE FERRONEMÁTICOS SUBMETIDOS A CAMPOS MAGNÉTICOS PULSADOS

Celso Yuji Matuo e Antonio Martins Figueiredo Neto

Grupo de Óptica de Cristais Líquidos - Depto. Fis. Exp. - IFUSP

**Palavras-chave**: cristal líquido, ferrofluido, dinâmica

Ferronemáticos são cristais líquidos nemáticos dopados com ferrofluidos. Neste trabalho foi utilizado um cristal líquido liotrópico na fase nemática calamítica uniaxial ( $N_c$ ), constituído de uma mistura de laurato de potássio (28,74%), decanol (6,64%) e água (64,62%). Os valores em parênteses são as proporções em massa. Utilizamos para o "doping" um ferrofluido iônico de grãos magnéticos de maguemita citratada (a carga elétrica dos grãos é dada pelos íons  $\text{Na}^+$ ), com diâmetro médio de 9,5nm. O ferronemático resultante possuía a concentração de  $2,36 \times 10^{13}$  grãos/cm<sup>3</sup>. As amostras de ferronemático foram colocadas em capilares planos de vidro ("microslides") de 400 $\mu\text{m}$  de espessura, 4mm de largura e 2cm de comprimento. Os "microslides" foram colocados em um sistema óptico com "laser" e polarizadores cruzados, na presença de dois campos magnéticos. O campo magnético principal é contínuo ( $H_1 = 2750\text{G}$ ), e a sua direção é paralela à direção do polarizador, e à direção do eixo principal da amostra (comprimento do "microslide"). O campo magnético secundário ( $H_2 = 550\text{G}$ ) é pulsado e é poicionado perpendicularmente à direção do campo magnético  $H_2$ , mas contido no mesmo plano definido pela amostra. Sob efeito apenas do campo magnético principal, as micelas do ferronemático orientam-se em algumas horas (3 horas) na direção do polarizador, resultando em uma mínima transmitância da amostra. Aplicando-se um campo pulsado, as partículas magnéticas sofrem uma rotação, dada pela razão  $H_2/H_1$  (0,2 rad), gerando um pulso de intensidade luminosa captada por um fotodiodo. Quando o pulso cessa, há uma relaxação da intensidade luminosa com o tempo. Essa relaxação pode ser ajustada por uma função de uma ou duas exponenciais, do tipo:  $I \propto \exp(-t/\tau)$ , onde  $\tau$  é o tempo característico da relaxação. Foram estudadas as variações dos tempos característicos de acordo com a duração do pulso  $H_2$ . Foi verificada a dependência da duração do pulso no processo de orientação e consequente relaxação das micelas no volume e das micelas aderidas às superfícies do "microslide". Resultados típicos obtidos para os tempos característicos: para um campo pulsado de 20s de duração, foi obtido  $\tau = 2,96\text{s}$  (decaimento caracterizado por uma função de uma exponencial). Para um pulso de 100s, foram obtidos dois tempos característicos (função de duas exponenciais):  $\tau_1 = 2,39\text{s}$  (curto) e  $\tau_2 = 178\text{s}$  (longo).

(FAPESP)

## INSTABILIDADES... PAREDES... ELIPSES..

*Manuel Simões*

*Fabiano César Cardoso*

Universidade Estadual de Londrina - Depto. de Física

*Palavras - Chave:* Cristais Líquidos, Defeitos, Instabilidades

Ao tomarmos amostras de Cristais Líquidos Nemáticos com alinhamento uniforme do diretor verifica-se, ao aplicarmos campos magnéticos uniformes de direção perpendicular ao diretor e intensidade superior ao campo crítico de Fredericks, o surgimento de uma seqüência unidimensional e periódica de paredes. A periodicidade dá-se ao longo da direção perpendicular ao campo magnético, e cada parede estende-se ao longo da direção desse campo. Uma vez formadas as paredes, observa-se uma evolução temporal no sistema, que depois de algum tempo leva as paredes originais e fecharem-se num conjunto de elipses. Mostraremos analiticamente, a partir da expressão de Energia Livre de Frank, usando técnicas de cálculo de variações acerca da variação de segunda ordem e fazendo o cálculo exato do campo de Jacobi associado, que: a) existe interação entre essas paredes; b) essa interação pode ser calculada analiticamente; c) essa interação faz com que essa estrutura periódica seja estruturalmente instável; d) a configuração estável é bidimensional e elíptica; e) os parâmetros geométricos dessa elipse (excentricidade, direção do semi-eixo maior, etc ...), que podem ser medidos diretamente, podem fornecer trivialmente os parâmetros físicos da amostra, tais como a razão entre constantes elásticas e a direção local do diretor.

## CAMPOS DE SUPERFÍCIE E CONSTANTE ELÁSTICA DE “SPLAY-BEND”

A. L. Alexe-Ionescu, S. Fontanini, A.M. Figueiredo Neto e G. Barbero  
Instituto de Física da USP, C.P. 66318, 05389-970 São Paulo, SP, Brasil

*Palavras-chave:* cristais líquidos, constantes elásticas

As propriedades elásticas dos cristais líquidos nemáticos são usualmente descritas por meio da teoria elástica contínua. Nehring e Saupe [J. Nehring and A. Saupe, J. Chem. Phys. 54, 337 (1971)] em 1971, propuseram uma generalização da densidade de energia elástica de Frank. Um termo adicional, que depende de  $\text{div}(\mathbf{n} \text{ div} \mathbf{n})$  aparece, e uma constante que mistura “splay” e “bend” é introduzida:  $k_{13}$ . Um termo linear em derivadas de segunda ordem de  $\mathbf{n}$  originam essa contribuição elástica. Esse termo fornece apenas uma contribuição de superfície, e espera-se que tenha um importante papel na determinação das configurações de equilíbrio, se condições de contorno de ancoramento fraco são consideradas. Muitos autores estudaram os aspectos teóricos da presença de  $k_{13}$  nas propriedades elásticas dos cristais líquidos. Por outro lado, do ponto de vista experimental, poucos resultados relativos a esse aspecto estão disponíveis na literatura [R. Barberi et al., Phys. Rev. E 50, 2093 (1994); S. Fontanini et al., Phys. Rev. E (1996)]. Todos esses trabalhos experimentais utilizam técnicas ópticas para obter um valor efetivo de  $k_{13}$ . Neste trabalho mostramos que um campo de superfície introduz uma deformação sub-superficial não localizada, em torno de uma espessura a partir da superfície onde o campo existe. A expressão analítica dessa deformação lembra aquela introduzida pela constante  $k_{13}$ . Dessa forma, os resultados detectáveis dessa constante elástica possuem duas contribuições, uma intrínseca do cristal líquido e outra extrínseca, característica da superfície. A contribuição extrínseca é proporcional ao comprimento de penetração do campo de superfície.

(Apoio financeiro: FAPESP, CNR.)

### Medida da constante elástica efetiva Splay-Bend em Cristais Líquidos Liotrópicos Ferronemáticos: A influência da superfície.

Autores: Sandro Fontanini e Antônio Martins Figueiredo Neto  
Universidade de São Paulo, Grupo de Óptica dos Cristais Líquidos.

Os cristais líquidos liotrópicos ferromagnéticos são sistemas compostos por uma mistura de moléculas anfifílicas e solvente, dopados com grãos magnéticos.

O composto que utilizamos é formado por DACI (6,46% molar),  $\text{NH}_4\text{Cl}$  (2,43% molar), e  $\text{H}_2\text{O}$  (91,11% molar). Apresenta uma fase lamelar até a temperatura de 24 °C, e a partir desta, a fase passa a ser nemático discótica até 44 °C, para em seguida se tornar isotrópica. A amostra já preparada é dopada com ferrofluido na proporção de 1  $\mu\text{l}$  por 1ml. Neste trabalho analisaremos a influência de uma superfície previamente tratada sobre as propriedades elásticas de nossas amostras.

Além das constantes usuais que aparecem na teoria elástica do contínuo de Frank, Nehring e Saupe introduziram uma nova constante elástica que leva em conta a interação do meio com a superfície, e recebeu a denominação de constante elástica splay bend.

Uma forma experimental de nos aproximarmos do valor real de  $k_{13}$  foi proposta por G. Barbero e colaboradores, definindo uma constante elástica efetiva splay bend  $k_{13}$ . O que determinamos experimentalmente por processos ópticos é a razão  $K_{13} = k_{13}/k$ , através da determinação do ângulo  $\theta_b$  que o diretor no volume, forma com a normal a superfície, e  $\theta_c$  ou eixo fácil, que é o ângulo que minimiza a energia na superfície. A relação final cujo fitting leva ao valor de  $K_{13}$  tem a forma  $\theta_b = \theta_c - (K_{13}/2)\text{sen}(2\theta_c)$ . Em trabalhos anteriores já havíamos detectado a variação de  $K_{13}$  quando alterávamos a concentração dos grãos de ferrofluido na amostra, evidenciando experimentalmente pela primeira vez a existência de componentes extrínsecas na constante elástica.

O comportamento de  $K_{13}$  como função da temperatura é o mesmo que foi obtido para cristais líquidos termotrópicos e liotrópicos, é positivo e da ordem de 1 para a temperatura ambiente. Próximo a superfície  $K_{13}$  depende não somente do cristal líquido nemático mas também da concentração de ferrofluido na amostra. No nosso caso aumentando a concentração de uma fator 5,  $K_{13}$  decresceu de 8% no meio do domínio nemático. Como sabemos, na constante elástica em estudo, estão embutidas contribuições intrínsecas e extrínsecas. A contribuição intrínseca de  $K_{13}$  está ligada a interação molecular que depende da orientação e posição relativa das moléculas. Esta contribuição é independente da concentração de ferrofluido e deve depender também do tratamento da superfície, mas a parte extrínseca como mostramos, depende.

# ELASTIC PROPERTIES OF NEMATICS IN THE ELLIPSOIDAL APPROXIMATION: THE QADRUPOLAR INTERACTION

*G. Barbero, and S. Ponti*

Dipartimento di Fisica del Politecnico di Torino  
Torino, Italy

and

*L. R. Evangelista*

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá  
Maringá, Paraná, Brazil

*Palavras-Chave:* elastic, nematics, quadrupolar

In the classical phenomenological Frank theory, nematics are considered as a continuous media whose free energy density is defined as a function of only the spatial derivatives of the director. Some of the phenomenological coefficients are macroscopic parameters called elastic constants of splay, twist and bend and denoted, respectively, by  $K_{11}$ ,  $K_{22}$  and  $K_{33}$ . From the theoretical point of view, commonly a molecular approach is employed to determine the elastic constants. For simplicity it is useful to consider an interaction volume of spherical shape to perform the calculations which are, in general, very ponderous. The consideration of an ellipsoidal shape for the interaction volume introduces a natural dependence on the anisotropy for the elastic parameters[1]. In this work we calculate the elastic constants for a nematic in the hypothesis of an ellipsoidal interaction volume. We assume a phenomenological screened quadrupolar interaction between the molecules. This kind of interaction is due to the presence of ions in a real nematic sample. Thus, in this molecular approach all the elastic constants are explicitly determined, including the so-called 'splay-bend',  $K_{13}$  and the 'mixed saddle-splay',  $K_{24}$  ones. In particular, we shown the dependence of the eccentricity for these quantities. In the limit of spherical interaction volume, i.e., when the eccentricity goes to zero, all the elastic constants are shown to vanish, thus indicating that the quadrupolar interaction alone cannot give rise to the nematic mesophase.

[1] G. Barbero, L. R. Evangelista, S. Ponti, and M. Giocondo, *J. Phys. II France* **4**, 1519, 1994.

## INSTABILIDADE NO LÍQUIDO DE FERMI DE LANDAU

*Sérgio Luiz Garavelli e Álvaro Ferraz*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada - UnB

*Palavras-chave:* líquido de Fermi, supercondutores, diagramas

Supercondutores de alta temperatura apresentam um fase metálica anômala acima de  $T_c$ . Isto tem levado a inúmeras conjecturas a respeito da natureza eletrônica da fase normal destes materiais. Acima da temperatura crítica ( $T_c$ ), o sistema apresenta-se como um metal pobre, as quasipartículas e a superfície de Fermi não são bem definidas como deveriam ser em um estado de líquido de Fermi. Isto indica que neste regime o sistema não forma um líquido de Fermi. Logo, é razoável esperar que este comportamento anômalo está associado a um novo mecanismo eletrônico que induz a transição para a fase supercondutora a alta temperatura em  $T = T_c$ .

Mostramos que para um regime de interação suficientemente forte e no limite em que o parâmetro de renormalização de carga  $Z_F$  tendo à zero, há uma classe de diagramas na expansão em série da função  $K$  que é dominante em todas as ordens, para uma escala de baixa energia na vizinhança da superfície de Fermi. Estes diagramas que denominamos "exchange ladder" são somados até ordem infinita e um pólo puramente imaginário é observado na função  $K$  o que torna o líquido de Fermi instável neste regime.

## QUASIPARTICLES IN A STRONGLY INTERACTING REGIME

*Álvaro Ferraz*

Centro Internacional de Física da Matéria Condensada

*Keywords:* quasepartículas, grupo de renormalização, supercondutividade

The Fermi liquid is the reference model for conduction electrons in a normal metal. Unfortunately there is a large amount of experimental evidence indicating that the normal phase of high- $T_c$  superconductors does not fit in this framework. For these materials there are several physical quantities which have either the wrong energy or wrong temperature dependence. This behavior implies that the charge renormalization parameter is either infinitesimally small or identically zero. This parameter measures the amount of single-particle character in the electronic excitations of the interacting system. If spectral function  $A(p, \epsilon)$  has no central peak. As a result if quasiparticles exist they are either of more extended nature or the Fermi surface has no fixed position and is not sharply defined in momentum space. Both these conditions violate Fermi liquid theory. We analyze these two possibilities in this present work.

Using the renormalization group approach we show that if the electronic effective mass  $m^*$  is sufficiently large the Fermi liquid is unstable for  $d = 2$ . In higher dimensions if the Fermi surface is not sharply defined and if its position is not fixed in momentum space there may exist quasiparticles of different nature in the physical system. We construct a model which takes explicit account of this feature. We show that if the 'low-energy' fields are integrated out the resulting effective model has a coupling function which can be large and negative. The quasiparticles can attract each other and form bound states. This leads to a breakdown of single particle representation and to superconductivity at high energies.

## A POSSÍVEL FORMA DA FUNÇÃO DE SCALING DA TRANSIÇÃO SUPERCONDUTOR-ISOLANTE

*C. A. M. Santos, A. J. S. Machado,*

Grupo de Supercondutividade, Departamento de Engenharia de Materiais, FAENQUIL,  
12.600-000 Lorena - SP

*S. Moehlecke e Y. Kopelevich*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade de Campinas, UNICAMP,  
13.083-970 Campinas - SP

**Palavras-Chave:** transição supercondutor-isolante, scaling, universalidade

Após o desenvolvimento da teoria de scaling para a transição supercondutor-isolante (SIT) no início desta década, muita atenção tem sido dada à sua confirmação experimental. Nesta teoria foi previsto que o comprimento de coerência supercondutor diverge com  $|X - X_C|^{-\nu}$ , quando  $X$  se aproxima criticamente de  $X_C$ , onde  $X$  é o grau de desordem do supercondutor ou o campo magnético aplicado e  $\nu \geq 2/d$ . A interpretação física nesta teoria tem sido relacionada ao fato que desordem causa localização de pares de Cooper e o aumento do campo magnético induz uma transição da fase Vortex-glass para Bose-glass. Geralmente, o critério para a observação da boa concordância entre a teoria de scaling e os resultados experimentais está relacionado à presença de dois comportamentos universais, devido aos estados supercondutor ( $X < X_C$ ) e isolante ( $X > X_C$ ). Neste trabalho é apresentado a possível forma da função de scaling. Nós temos obtido este resultado usando as previsões teóricas requeridas pela SIT e a observação experimental da dependência matemática entre a resistência elétrica e o campo magnético ou a densidade de corrente para uma amostra policristalina de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_0.46\text{Pr}_0.54\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$  e para resultados reportados previamente na literatura. A forma final da função de scaling tem sido então testada diretamente e um excelente acordo tem sido obtido em todas as análises (erro máximo  $< 1.5\%$ ). Isto tem proposto, portanto, que a excelente correlação da forma da função de scaling e os resultados experimentais seja devido a sua possível universalidade.

(CNPq)

## SUPERCONDUTIVIDADE EM CADEIAS INOMOGÊNEAS

*Thereza C. de L. Paiva e Raimundo R. dos Santos*

*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Niterói - RJ*

**Palavras-Chave:** supercondutividade, modelo de Hubbard, multicamadas

O estudo de multicamadas de NbGe/Ge (supercondutor / semicondutor) mostrou que as propriedades supercondutoras podem depender sensivelmente da espessura da camada do material supercondutor. Para melhor compreender os mecanismos por trás deste comportamento fazemos aqui um estudo sistemático da supercondutividade em multicamadas através de um modelo simples. Consideramos cadeias unidimensionais descritas por um modelo de Hubbard atrativo em que o acoplamento intra-sítio varia com a posição, formando uma estrutura periódica. A Hamiltoniana é dada por:  $H = -t \sum (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.}) + \sum U_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$

onde dois casos são considerados separadamente. No primeiro temos combinações de  $U_i = -|U|$  e  $U_i = 0$ , e no segundo temos  $U_i = -|U|$  e  $U_i = |U|$ . A Hamiltoniana é diagonalizada para cadeias de até doze sítios via método de Lanczos para a obtenção do estado fundamental. Isto é feito para vários preenchimentos de banda e também para várias configurações  $\{U_i\}$ . As funções de correlação de spin, de carga e supercondutoras singlete e triplete são examinadas.

Por comparação com sistemas homogêneos foi possível verificar que a estrutura de camadas pode afetar drasticamente as correlações supercondutoras. Para todas as configurações onde algum  $U_i = 0$  as funções de correlação supercondutoras são desprezíveis, em todos os preenchimentos de banda estudados. Para a banda semi-cheia a presença da estrutura de camadas diminui fortemente as correlações supercondutoras que são encontradas em sistemas homogêneos, enquanto que para outros preenchimentos de banda (como banda 1/4, onde não há supercondutividade em sistemas homogêneos) ela é favorecida pela estrutura de camadas.

(CNPq)

## PROPRIEDADES DE EQUILÍBRIO E ELÁSTICAS DA REDE DE VÓRTICES DE SUPERCONDUTORES ANISOTRÓPICOS DE ESPESSURA FINITA

*Edson Sardella*

Departamento de Física-Faculdade de Ciências-UNESP-Bauru-C.P. 473-CEP 17033-360

*Palavras-Chave* - Rede de vórtices, supercondutores anisotrópicos, propriedades elásticas.

No estado misturado de supercondutores do tipo-II, o campo magnético penetra na amostra na forma de linhas de fluxo quantizadas. Cada linha consiste de um caroço circundado por supercorrentes circulares, o assim chamado vórtice. Para os supercondutores convencionais, que são materiais isotrópicos, os vórtices formam um arranjo periódico em forma de rede hexagonal triangular. Os supercondutores a altas temperaturas são materiais altamente anisotrópicos. Tanto no lado experimental [1,2] quanto no lado teórico [3,4] diferentes tipos de rede foram observadas para estes materiais. A técnica mais comumente usada para se estudar as propriedades de equilíbrio de rede de vórtices é a técnica de decoração a qual consiste em tirar imagens das pontas das linhas de vórtice que emergem da superfície da amostra. Para interpretar os resultados experimentais de decoração e decidir se as imagens de superfície são de fato representativas das interações entre vórtices dentro da amostra, temos que ter um entendimento detalhado dos efeitos de superfície. Interações entre as pontas de vórtices na superfícies e dentro da amostra podem competir umas com as outras. Isto pode ter um papel decisivo na formação da rede de vórtices. Neste trabalho investigamos estes problemas para diversas geometrias dos supercondutores anisotrópicos usando a teoria de London. Outra questão que estamos é o efeito da espessura do supercondutor nas propriedades elásticas da rede de vórtices, em particular na temperatura de derretimento desta rede.

[1] C. A. Bolle, P. L. Gammel, D. J. Bishop, D. B. Mitzi, e A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2270 (1991).

[2] I. G. Grigorieva, J. W. Steeds, G. Balakrishnan, e D. M. Paul, *Phys. Rev. B* **51**, 3765 (1995).

[3] L. J. Campbell, M. M. Doria, e V. G. Kogan, *Phys. Rev. B* **38**, 2439 (1988).

[4] L. L. Daemen, L. J. Campbell, e V. G. Kogan, *Phys. Rev. B* **46**, 3631 (1992).

## CARACTERIZAÇÃO DO ESTADO DE OXIDAÇÃO DE SnO<sub>2</sub> POLICRISTALINO PELA ESPECTROSCOPIA DE FOTOELÉTRONS EXCITADOS POR RAIOS-X (XPS)

José A. Cerri<sup>1</sup>, Elson Longo<sup>1,2</sup>, Edson R. Leite<sup>1,2</sup>, José Arana Varela<sup>1,3</sup> e Pedro A.P. Nascente<sup>1,4,5</sup>

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais/UFSCar, <sup>2</sup>Departamento de Química/UFSCar, <sup>3</sup>Instituto de Química/UNESP - Araraquara, <sup>4</sup>Departamento de Engenharia de Materiais/UFSCar, <sup>5</sup>Centro de Caracterização e Desenvolvimento de Materiais/UFSCar/UNESP

**Palavras-Chave:** SnO<sub>2</sub>, estado de oxidação, espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X

Cerâmicas policristalinas de SnO<sub>2</sub> têm uma série de aplicações tecnologicamente importantes, tais quais: sensores de gases, catálise heterogênea e dispositivos varistores. A adição de MnO<sub>2</sub> ou CoO promove a densificação durante a sinterização e a formação de barreiras de potencial nos contornos de grão. As amostras de SnO<sub>2</sub> foram dopadas com MnO<sub>2</sub> (0,5 % molar) e sinterizadas em ar a 1270 °C durante 4 horas. As análises por microscopia eletrônica de varredura e difração de raios-X indicam a presença de apenas uma fase cristalina (tipo rutilo). A espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (*X-ray photoelectron spectroscopy* - XPS) foi empregada para identificar o estado de oxidação da superfície das amostras polidas. Foi utilizado o espectromicroscópio de superfícies do CCDM, que contém um analisador de energia hemisférico, sistema triplo de detecção de elétrons e câmara de ultra-alto vácuo. Como fonte excitadora foi empregada a radiação K $\alpha$  de Mg ( $h\nu = 1253,6$  eV). A identificação dos elementos presentes na superfície foi feita diretamente pela determinação das energias de ligação dos picos dos fotoelétrons dos níveis de caroço. A posição exata de um pico fotoelétrico indica o estado químico do átomo emissor. As energias de ligação dos níveis de caroço dos átomos são suficientemente afetadas pelo seu ambiente químico (ou seja, estado de oxidação, sítios da rede, estrutura molecular, etc) que provocam um deslocamento de 0,1 a 10 eV nas energias dos fotoelétrons. Estes deslocamentos químicos devem-se às variações na blindagem eletrostática sofridas pelos elétrons de caroço quando os elétrons de valência do átomo de interesse são atraídos ou repelidos. A análise dos resultados indica que o estanho está na forma reduzida, enquanto que o oxigênio está associado a dois ambientes químicos diferentes.

## CORE LEVEL LIFETIMES AND AUGER LINE WIDTHS OF THE L<sub>2,3</sub>M<sub>4,5</sub>M<sub>4,5</sub> TRANSITIONS OF THE 4D METALS

G.G.Kleiman, A. Siervo, R. Landers and S.G.C.de Castro  
Instituto de Física Gleb Wataghin Univer. Estadual de Campinas

**Keywords:** 4d metals, core level lifetimes, Auger linewidths

Natural line widths are fundamental in studies of many phenomena involved with the emission of electrons from solids such as x-ray photoemission or the line shape of Auger peaks.

We present XPS measurements, for the first time, of the 2p core levels of the 4d metals from Nb to Sb and correlate these measurements with core level lifetimes and spectral features of the L<sub>2,3</sub>M<sub>4,5</sub>M<sub>4,5</sub> Auger transitions, which are also presented.

The data for the 2p levels was obtained exciting the samples with characteristic X-rays from a Ti anode (4.510,84 eV and 4.504,86 eV). Due to the complex structure of the radiation used the data was deconvoluted using a measured Cu 2p<sub>3/2</sub> line as the machine function thus also reducing the effect of the analyzer resolution on our results. This seems to be a reasonable choice of machine function as the Cu 2p<sub>3/2</sub> has a natural width which is considerably less than the 2p levels of the 4d metals we studied.

Comparison of the Auger and lifetime data elucidates the fundamental processes involved in core hole recombination.

(FAPESP, CNPq, FINEP)

## ESTUDO DOS ESPECTROS DE ELETRONS AUGER $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$ EM OXIDOS DE Cu E Ni

*M. Abbate*

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPq,

*G. Zampieri*

Centro Atômico Bariloche, CNEA,

**Palavras-Chave:** Espectros Auger, óxidos de metais de transição, campo cristalino.

Estudo-se os espectros de elétrons Auger do tipo  $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$  em óxidos de Cu e Ni. A motivação do trabalho é determinar a influência do campo cristalino e dos processos de transferência de carga nos espectros. Os espectros apresentam dois grupos de picos que estão separados pela interação entre o spin e o momento orbital do nível interno. Estes grupos de picos correspondem aos espectros  $L_{2,3}M_{4,5}M_{4,5}$  e  $L_{3,3}M_{4,5}M_{4,5}$ , respectivamente. Os espectros mostram também transições do tipo  $L_{3,3}M_{4,5}-M_{4,5}M_{4,5}M_{4,5}$  que tem um buraco  $M_{4,5}$  extra, tanto no estado inicial quanto no final. Os espectros  $L_{3,3}M_{4,5}M_{4,5}$  dos metais puros mostram um multipletto que corresponde às diferentes possibilidades de acoplamento no estado final. Os espectros dos óxidos mostram um desdobramento extra no multipletto devido ao efeito do campo cristalino. Os espectros dos óxidos apresentam também um satélite devido aos processos de transferência de carga entre o metal e o ligante.

## ESTUDO DOS EFEITOS DA TEMPERATURA NOS ESTADOS DE SUPERFÍCIE DE METAIS NOBRES POR UPS

*R. Paniago<sup>1</sup>, R. Matzdorf<sup>2</sup>, A. Goldmann<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Física, UFMG

<sup>2</sup> Fachbereich Physik, Universitat Kassel, Germany

**Palavras-Chave:** Espectroscopia de Fotoelétrons, Estados de Superfície, Metais Nobres

Através da Espectroscopia de Fotoelétrons com Resolução Angular Excitados por Luz Ultravioleta (ARUPS) é possível tanto se estudar a estrutura eletrônica do "bulk" quanto a estrutura eletrônica de superfície. Isto se deve ao fato de que o livre caminho médio dos fotoelétrons excitados por luz ultravioleta é baixo ( $\lambda=10-100$  Å). As linhas nos espectros correspondentes a estados de superfície podem ser facilmente identificados através de sua alta sensibilidade em relação a impurezas na superfície e pelo fato de que a sua dispersão  $E(k)$  depende somente do vetor  $k$  paralelo à superfície.

A influência da temperatura nos estados de superfície é estudada experimentalmente através de ARUPS. Com o aumento da temperatura é observado em geral um alargamento e diminuição das linhas correspondentes aos estados de superfície, assim como uma alteração da energia de ligação. O alargamento e diminuição das linhas é explicado através da interação com fônons no processo de fotoemissão, que reduz o número das transições diretas.

Neste estudo é dada especial atenção à variação da energia de ligação dos estados de superfície em função da temperatura. O comportamento do estado tipo "Shockley" em Cu(111), Ag(111) e Au(111) é interpretado quantitativamente através de um modelo unidimensional ("Modelo de Fase") levando-se em conta a dilatação da rede que modifica a estrutura eletrônica do "bulk" e conseqüentemente a energia de ligação dos estados de superfície tipo "Shockley".

## ESPECTROSCOPIA de FOTOEMIÇÃO em LIGAS de a-GeN e a-SiN

A.R. Zanatta e I. Chambouleyron

Dep<sup>o</sup> de Física Aplicada, Instituto de Física "Gleb Wataghin",  
Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, CEP 13083-970, Campinas, S.P.

**Palavras-Chave:** fotoemissão, deslocamento químico, estados de valência

A introdução de átomos de N em redes de materiais diversos tem sido objeto de muita investigação nos últimos anos. Tanto a nível científico quanto tecnológico, os interesses são os mais variados possíveis: *hard coatings*, barreiras de difusão, janelas ópticas, camadas isolantes, dopagem, etc... Especificamente neste trabalho, serão apresentados resultados relativos à introdução de átomos de N em redes amorfas de Ge (a-GeN) e de Si (a-SiN). As técnicas de XPS (*x-ray photoelectron spectroscopy*) e UPS (*ultra-violet photoelectron spectroscopy*) foram amplamente utilizadas para esta finalidade. Os resultados indicam que, tanto a presença quanto a concentração de átomos de N são responsáveis por importantes transformações nas características do a-Ge e do a-Si. A baixas concentrações, os átomos de N podem atuar como dopantes do tipo n, conforme indicam medidas de transporte; neste caso, poucas modificações (a menos dos efeitos de dopagem) podem ser verificadas a nível estrutural e/ou eletrônico. Altas concentrações de N, no entanto, dão origem a drásticas transformações estruturais e eletrônicas. A partir da análise dos resultados de XPS pode-se obter os deslocamentos químicos dos níveis Ge3d e Si2p, bem como a distribuição de ligações químicas, em função da concentração de N. Medidas de UPS (aliadas a outras técnicas de espectroscopia óptica) confirmam o aumento no *band gap* destes compostos, bem como o surgimento de novas estruturas devidas à presença do N.

(FAPESP, CNPq)

## SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO NAS BORDAS M<sub>4,5</sub> DE TERRAS-RARAS: UM EXPERIMENTO DE TRANSMISSÃO DE RAIOS-X MOLES

Flávio César Vicentin\*, Stefano Turchini, Francisco Yubero, Jan Vogel, Maurizio Sacchi  
LURE, Centre Universitaire Paris-Sud - Orsay - France  
\*LNLS, CNPq/MCT - Campinas - Brasil

**Palavras-chave:** seção de choque de absorção, terras-raras, transmissão de raios-X moles

A transmissão de raios-X moles através de camadas de algumas terras-raras (Gd, Dy, Ho e Er), com espessuras entre 2 e 400 Å, foi medida cobrindo a faixa de energia que inclui as bordas de absorção M<sub>4,5</sub> (transições 3d→4f). Estes experimentos foram realizados na estação de espectroscopia de absorção de raios-X moles (SA22) da fonte de luz síncrotron SuperACO do LURE (França). A partir destas curvas derivamos as seções de choque de absorção, as quais mostram um bom acordo com cálculos atômicos. Nossos resultados para camadas finas indicam um limite para a diluição de amostras homogêneas de  $\approx 10^{18} \cdot 10^{19}$  átomos/cm<sup>3</sup>. A comparação entre os espectros medidos simultaneamente por transmissão e rendimento total de elétrons (TEY) indicam efeitos de saturação em TEY.

Em conclusão, a transmissão é um útil e interessante esquema de detecção para espectroscopia de absorção de raios-X moles. A escolha de amostras que podem ser estudadas é mais limitada que para outras técnicas, mas mesmo assim inclui uma importante classe de amostras, como camadas metálicas finas e multicamadas (magnéticas ou não), compostos organometálicos, polímeros dopados com metais e amostras biológicas.

## EFFECT OF SURFACE MISORIENTATION ON THE NUCLEATION OF THIN InAs FILMS ON InP GROWN BY CHEMICAL BEAM EPITAXY

*M.A.Cotta<sup>a</sup>, C.A.C. Mendonça<sup>a</sup>, K.M.Ito-Landers<sup>a</sup>, M.M.G.de Carvalho<sup>a</sup> and R.B.Martins<sup>b</sup>*

<sup>a</sup>UNICAMP, IFGW, Departamento de Física Aplicada / LPD, CP 6165, 13081-970, Campinas SP.

<sup>b</sup>Centro de Pesquisa e Desenvolvimento Telebrás, 13085, Campinas, SP

*Palavras-chave:* InAs/InP, CBE, islanding

InAs/InP strained quantum wells (QW) present a potential application for long-wavelength optoelectronic devices due to the particular electronic properties of this heterostructure. In spite of the large lattice mismatch of the system - about 3.2% - the QW structures have shown good optical properties for well thicknesses up to 4 monolayers (ML). For thicker wells, island growth takes place, leading to increased roughness in the surface morphology of such structures, pronounced photoluminescence peak broadening.

In this work we study on the effect of kinetics on the nucleation of InAs films on InP by Atomic Force Microscopy (AFM) and low temperature photoluminescence (PL). InAs layer thickness was varied from ~3-4 ML (close to the onset of islanding reported on literature) to ~20ML. AFM results show that for a certain film thickness, the onset of the islanding is dependent on both growth rate and temperature. The islanding also seems to occur, for the same growth conditions, at a lower critical thickness for misoriented substrates than nominal ones. The shape of the islands is strongly influenced by the direction of misorientation; the analysis of island distribution along step edges on nominal substrates indicates the presence of a step-edge barrier, more effective on the B-step, pinning the adatoms on the upward terrace and altering the surface diffusion dynamics during deposition of the InAs thin film.

PL results of InAs/InP QW structures clearly show the effect of confinement in this system. The energy of the PL peaks are in very good agreement with the distribution of island sizes observed by AFM. Broadening of PL peaks is observed for both narrow (4ML) and wide (18ML) wells, while multiple peaks can be distinguished for structures with 8ML.

(Finep/FAPESP/CNPq/Telebrás)

## FORMAÇÃO DA ESTRUTURA INCOMENSURÁVEL "5X5" DE Cu/Si(111)7X7 ESTUDADA POR STM

*Renata A. Simão, Carlos A. Achete*

*Programa de Eng. Metalúrgica e de Materiais - COPPE - UFRJ*

*palavras-chave:* siliceto de cobre; STM; epitaxia

A superfície de filmes de até 2ML de Cu/Si(111)7x7 tratados termicamente a temperaturas de até cerca de 700°C apresenta uma superestrutura incomensurável com o substrato de periodicidade próxima a (5,4x5,4) em relação ao Si(111)1x1. Esta reconstrução já foi estudada anteriormente por diversos autores utilizando uma ampla gama de técnicas de análise, inclusive STM, mas muitas dúvidas ainda existem em relação ao seu mecanismo de formação e à estrutura geométrica da mesma.

Neste trabalho serão apresentados estudos com STM e Auger da formação e evolução térmica de filmes de até 2ML de cobre depositados sobre Si(111)7x7. Foram utilizados para este estudo monocristais de silício de diferentes ângulos de corte em relação ao plano (111). O substrato foi aquecido repetitivamente em ultra alto vácuo (pressão de base menor que  $5 \times 10^{-10}$  Torr) por bombardeamento de elétrons e a superfície de Si(111)7x7 foi obtida livre de contaminantes como verificado por Auger e STM. Cobre foi então evaporado de um fio de tântalo por Efeito Joule.

A estrutura incomensurável foi formada à temperatura ambiente apenas em cristais de Si(111)7x7 com grande densidade de degraus. Em cristais onde o ângulo de corte é de 0° em relação a superfície (111) a formação da estrutura incomensurável só se dá por ativação térmica. Filmes como depositados de ~1ML de Cu/Si(111)7x7 cortado a 0° apresentam um arranjo bastante ordenado mas a formação da estrutura "5x5" não foi observada. Acreditamos, então, que a estrutura "5x5" é formada por cobre e silício em um arranjo bidimensional e que, à temperatura ambiente, o silício necessário para sua formação é fornecido pelos degraus onde os átomos de silício estão mais fracamente ligados. Em cristais com poucos degraus não há silício suficiente para a formação da estrutura incomensurável à temperatura ambiente e é então necessária ativação térmica para liberar o silício dos terraços. A nucleação se dá ao mesmo tempo em diversos sítios no terraço e o filme se apresenta morfologicamente bastante diverso ao formado à temperatura ambiente.

## SPACE-CHARGE WAVES IN PHOTOREFRACTIVE CRYSTALS

*K. H. Ringhofer*

Department of Physics- University of Osnabrück  
D-49069 Osnabrück, Germany

*Palavras-Chave:* space-charge waves, photorefractive crystals

Many phenomena connected to volume phase holograms in photorefractive crystals are easily and naturally explained in the language of space-charge waves. Since volume phase holograms are of interest for image storing, information processing, phase conjugation and nonlinear wave mixing, the study of space-charge waves seems to be of practical importance. The best known examples of space-charge waves are the "running holograms" used in sillenites to compensate for their weak electro-optic effect. They are nothing else but forced space-charge waves accompanied by refractive index wave. Choosing the right driving frequency one can exploit resonance. The experimental setup is two-wave mixing with properly chosen detuning frequency. A space-charge wave is a plane wave perturbation of an equilibrium state obtained by homogeneous illumination of an (infinitely extended) photoconductor. In sillenites, assuming wave vector  $k$  and frequency  $\omega$  one obtains a dispersion law of rather unusual form:  $\omega$  is not proportional to  $k$  as f.i. in electrodynamics, but inversely proportional to a certain component of the  $k$ -vector. The equations governing the behaviour of space-charge waves show a quadratic nonlinearity. Therefore together with a fundamental space-charge wave harmonic space-charge waves are excited and often subharmonic space-charge waves are excited "parametrically". In other words, spatial subharmonics are the result of an instability of the fundamental harmonic. Not only "exact" subharmonics have been observed but also "split" subharmonics with small transverse components. This phenomenon is not yet understood and is currently a matter of intensive study.

## HOLOGRAMAS EM $\text{LiNbO}_3$ COM ALTA EFICIÊNCIA E BAIXO RUÍDO PARA MEMÓRIAS ÓPTICAS

*J. Frejlich, P. M. Garcia e A. A. Freschi*

Laboratório de Óptica-IFGW-UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
13083-970 Campinas-SP

*Palavras-Chave:* memórias ópticas, cristais-fotorrefrativos, holografia

O niobato de lítio ( $\text{LiNbO}_3$ ) e outros materiais fotovoltaicos são muito interessantes como memórias ópticas devido à capacidade de armazenar grande quantidade de dados durante um tempo bastante longo. Eles apresentam porém, alguns inconvenientes sérios que são, em primeiro lugar, a facilidade com que os feixes de luz coerente geram hologramas "parasitas" (por divisão e interferência no interior do material) que espalham a luz durante o registro, gerando um "ruído" óptico que prejudica a leitura posterior dos sinais. O segundo inconveniente deriva do fato que o padrão luminoso utilizado para gravar o holograma no material é pela sua vez difratado por esse mesmo holograma num processo chamado de "auto-difração" (self-diffraction), produzindo um holograma fora das condições de Bragg e que por esse motivo apresenta uma eficiência de difração menor que a esperada durante a leitura (reconstrução do holograma). Nesta comunicação apresentamos uma técnica de gravação que permite obter hologramas com 100% de eficiência de difração (o que não seria possível caso ele estivesse fora de Bragg) não levando em conta a absorção nem o espalhamento da luz no material, e reduzir o nível de luz espalhada em quase uma ordem de grandeza. A técnica se baseia no registro holográfico estabilizado e os experimentos são conclusivos, apesar de não termos ainda um modelo matemático completo para interpretar os resultados.

(CNPq e Volkswagen-Stiftung/Alemanha)

## Optical implementation of image encryption using random phase encoding and spatial light modulators

*Luiz Gonçalves Neto<sup>1</sup> and Yunlong Sheng<sup>2</sup>*

(1) Laboratory of Integrated Systems, EPUSP, SP, e-mail:lgneto@lsi.usp.br; (2) Université Laval, Centre d'Optique, Photonique et Laser, Québec, Canada

**Key Words :** Optical image encryption, Speckle-free kinoform, Band limited function

Optical phase masks have been proposed for security applications. A two dimensional phase mask consists of a very large number of pixels, where at each pixel the phase retardation is invisible by ordinary light intensity-sensitive detectors. It is difficult to determine the content of the random phase mask and to reproduce it without knowing the code in the mask.

One approach to use of the phase mask for security verification is bonding the random phase mask to the primary pattern to be protected, such as credit cards, passports or money bills. The verification can be done by an optical correlator. Only the authentic phase mask can be read out by the high optical correlation peak. A counterfeit mask with different random phase would be not able to yields high correlation peak. This approach has potential for large-scale commercial applications, provided that the phase masks are resistant to scratches and damage on the surfaces during the usage, and that the optical correlator has enough tolerance to the input phase error owing to the surface damage.

Another approach proposed recently by Refrigier and Javidi is encoding a primary image to stationary white noise using two random phase masks in the input plane and Fourier plane respectively. This method can be used to protect high security images. It is impossible to recover the encrypted images without knowing the key random phase mask, which has been used in the encoding.

In this work we discuss the problem encountered in optical implementation of the second approach. If the random phase masks are not band-limited, the speckle noise can make the reconstructed image indistinguishable. We propose a new method of image encryption using the speckle-free kinoform encrypted by a smoothed random phase mask. Optical experimental results using switchable spatial light modulators (SLM's) are shown.

(CNPq-Brazil)

## METROLOGIA DE SPECKLES, UNA HERRAMIENTA TÍPICAMENTE MULTIDISCIPLINARIA

*Nestor G. Gaggioli*

Dpto. ENDE, CAC, CNEA-CONICET, ARGENTINA

**Palavras-Chave:** efeito speckle, metrologia, aplicação multidisciplinar

Las investigaciones sobre el speckle son una continuación natural de los estudios sobre la difusión de la luz. Estos últimos tienen su origen hacia el 1500. Con la aparición del Láser se observa la estructura fina de la difusión de la luz. Se tienen dos clases de problemas: el problema directo y el problema inverso. Desde nuestro punto de vista, el problema es, casi siempre, el inverso, pero resolviendo de vez en cuando el directo, utilizando modelos que se acerquen a la realidad. Nuestras investigaciones abarcan sólo una parte de las que se llevan a cabo en el mundo entero: Estudio de Superficies Rugosas, Estudio de Superficies de Rugosidad Variable, Estudio de campos de partículas, Estudio de Volúmenes Dispersores, etc. Dada la diversidad de temas en que se trabaja relacionados con el speckle y sus aplicaciones, esta es una actividad típicamente interdisciplinaria. La dispersión de la luz proveniente de las estrellas es un tema en el que participan astrónomos y astrofísicos. Los meteorólogos se interesan en los fenómenos atmosféricos relacionados con la dispersión de la luz del sol por las partículas del aire. La dispersión de ondas de radar interesa a varias disciplinas. Los biólogos estudian la correlación del speckle con diferentes procesos de las plantas. A los médicos les interesa la posibilidad de estudiar partículas sanguíneas mediante la difracción de la luz por las mismas. También es de interés de químicos, físicos, bioquímicos, geofísicos, ingenieros, etc. el estudio de la luz dispersada por partículas, gases, líquidos, superficies, suspensiones coloidales, rocas porosas, etc. La Metrología de Speckles es una nueva herramienta multidisciplinaria en plena expansión y pretendemos mostrar sólo una pequeña fracción de sus posibilidades.

(CONICET - COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA, ARGENTINA)

## FLEXIBLE OPTICAL ELEMENTS AND THEIR APPLICATIONS TO MEASUREMENT

*Kiyofumi Matsuda*

Mechanical Engineering Laboratory, AIST, Japan

*Key words:* holographic optical element, measurement, light modulator

Several groups - including our own - have recently become interested in optical element research. Specifically, we are interested in the new Holographic Optical Element (HOE) and its applications in optical measurement and signal processing. For example, when an HOE is constructed, interference fringes are recorded on a photographic by holographic techniques. Our group is also interested in applications of Liquid Crystal Spatial Light Modulators and Electron Beam Pattern Generators in the construction of IC pattern. In this presentation, several of these research endeavors involving optical measurement are introduced. Two meanings of flexible optical elements are mentioned herein. One meaning deals with problems of flexibility when an optical element is designed. The second meaning has to do with flexibility problems when an optical element is used in the measurement process. In the context of these two points of view, our groups have developed flexible optical elements. In addition, research applications of optical measurements have been investigated. The following research themes are discussed in the presentation: a) multichannel optical spectrum analyzer for laser Doppler signals, using a Liquid Crystal Spatial Light Modulator; b) analysis of interferences fringes using Liquid Crystal Spatial Light Modulator in straightness measurements with holographic elements; c) application of Liquid Crystal Spatial Light Modulator to a scatter plate interferometer; d) construction of diffractive optical elements for optical measurement, resulting from Electron Beam Pattern Generator.

(MECHANICAL ENGINEERING LABORATORY, AIST, JAPAN)

## MEDIDA DA ATIVIDADE BIOLÓGICA SUPERFICIAL USANDO CORRELAÇÃO DE LASER-SPECKLE EM TEMPO REAL

*Mikiya Muramatsu<sup>1</sup>, Akiyoshi Mizukami<sup>2</sup> e José Alberto Ribeiro<sup>1</sup>*

1. Instituto de Física - USP

2. Faculdade de Tecnologia de São Paulo

*Palavras-Chave:* correlação de "speckle", atividade biológica, processamento de imagens

Quando um objeto difuso é iluminado por luz coerente (laser), a luz espalhada dá origem a um padrão característico granular denominado speckle. Como a superfície difusora é geralmente aleatória, as propriedades do speckle, como a distribuição de sua intensidade, constituída de pontos claros e escuros, e o seu diâmetro médio só podem ser determinadas por métodos estatísticos. A distribuição espacial do padrão é função da característica de iluminação da rugosidade da superfície e da geometria de observação, enquanto que a evolução temporal é função direta das variações que ocorrem na superfície e/ou no seu interior. Utilizamos as propriedades do padrão speckle para se estudar a atividade biológica superficial de frutas e vegetais usando a técnica de correlação em tempo real. O padrão resultante do espalhamento da luz laser (He-Ne, 5 mW) quando ilumina o objeto teste, é registrado por um sistema eletrônico de digitalização de sinais (câmera CCD, placa conversora, etc.) e um software desenvolvido para se efetuar a correlação do padrão em tempo real. Será apresentada a evolução temporal dessa correlação indicando a diminuição da atividade biológica para diferentes amostras.

## INTERCONEXÃO ÓPTICA NO ESPAÇO LIVRE DO TIPO UMA ENTRADA E QUATRO SAÍDAS PRODUZIDA HOLOGRAFICAMENTE

*Leandro L. Soares e Lucila Cescato*  
Laboratório de Óptica - IFGW - Unicamp

*Palavras Chave:* interconexão óptica, difração, holografia

O uso de interconexões ópticas de espaço livre representa uma interessante alternativa para a substituição de conexões de fibra óptica. Neste trabalho é descrito o cálculo e a construção de um componente óptico que tem a propriedade de dividir um sinal luminoso incidente em quatro sinais de saída paralelos e de mesma intensidade. Este dispositivo consiste num conjunto de 5 redes de difração gravadas sobre uma mesma face de um substrato de quartzo. A luz incidente na primeira rede (central) é difratada por transmissão em duas ordens +1 e -1 que sofrem reflexão total na superfície de trás do substrato. Os dois feixes refletidos incidem agora em duas outras redes idênticas que dividem igualmente cada feixe incidente em outros dois: um difratado por transmissão que retorna paralelo à direção de incidência e outro que reflete na rede (difração por reflexão de ordem zero) e sofre mais uma reflexão total na face posterior do substrato sendo posteriormente difratado nas duas últimas redes. A maior dificuldade na construção deste dispositivo está na obtenção no máximo de eficiência total (conversão da luz incidente nas quatro saídas) e na equipartição de intensidade entre as saídas. Para que estas condições sejam atingidas é necessário se projetar as redes para se obter as eficiências de difração necessárias. Para isto foram utilizados os resultados da Teoria Escalar e Vetorial de Difração. Os primeiros componentes foram construídos em fotorresina sobre quartzo para operar em  $\lambda=633$  nm à fim de facilitar a medida de seu desempenho. Os primeiros resultados mostraram uma homogeneidade na distribuição das intensidades de saída da ordem de 10 % e eficiência total de mesma ordem. Uma vez otimizado, o componente deve ser projetado para  $\lambda=1,3$   $\mu\text{m}$  e litografado totalmente em quartzo.

(FINEP e CNPq)

## APLICAÇÕES DO MODELO BOOLEANO PARA ENVELHECIMENTO BIOLÓGICO

*T.J.P.Penna*

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* envelhecimento biológico, evolução, dinâmica de populações

O envelhecimento, ou senescência, é um fenômeno biológico que ocorre em todos os organismos mais desenvolvidos. O declínio nas capacidades funcionais tais como o metabolismo, resposta a estímulos e capacidade de reprodução em algumas espécies são sinais do envelhecimento. Existem várias teorias sobre o envelhecimento biológico. A hipótese do acúmulo de mutações admite que alelos com mutações deletérias agindo em idades específicas serão mais frequentes em idades mais altas em consequência da pressão da seleção natural. Um modelo booleano para o envelhecimento biológico recentemente proposto (Penna, *J.Stat.Phys.* 78, (1995) 1629), baseado na teoria de acúmulo de mutações tem sido bem sucedido na reprodução das curvas de sobrevivências reais de várias espécies e outras várias aplicações. Neste trabalho vamos apresentar as mais recentes aplicações deste modelo à populações reais, entre elas: a questão do "oldest old", que é um menor declínio na probabilidade de sobrevivência para idades mais avançadas (Moss de Oliveira *et al.*, *Physica A221* (1995) 453); a influência das guerras e predadores naturais (Puhl *et al.*, *Physica A221* (1995) 445), a estrutura social dos lobos do Alasca, a importância dos cuidados dos pais (Thoms *et al.*, *J.Physique I 5* (1995) 1689) e da estratégia de reprodução das árvores na expectativa de vida destas espécies, o risco de reprodução e a auto-organização de fertilidade, etc (ver Racco *et. al.* nesta conferência). Não nos deteremos nos resultados analíticos e exatos para espécies semélparas e no problema da reprodução sexuada pois estes temas serão apresentados em detalhes nesta reunião por outros autores.

## MUTATION LOAD AND THE EXTINCTION OF LARGE POPULATIONS

*Américo T. Bernardes<sup>(a)</sup>*

Institute for Theoretical Physics, Cologne University, D-50923, Köln, Germany

*Palavras Chave:* population genetic theory, Monte Carlo, extinction

In the time evolution of finite populations, the accumulation of harmful mutations in further generations might lead to a temporal decay in the mean fitness of the whole population that, after sufficient time, would reduce population size and so lead to extinction. This joint action of mutation load and population reduction is called Mutational Meltdown and is usually considered only to occur in small asexual or very small sexual populations. However, the problem of extinction can not be discussed in a proper way if one previously assumes the existence of an equilibrium state, as traditionally assumed in the biological literature. By performing simulations in a genetically inspired model for time-changing populations, we show that mutational meltdown also occurs in large asexual populations and that the mean time to extinction is a nonmonotonic function of the selection coefficient. The stochasticity of the extinction process is also discussed. The extinction of small sexual  $N \sim 700$  populations is shown and our results confirm the assumption that the existence of recombination might be a powerful mechanism to avoid extinction.

(CNPq)

<sup>(a)</sup> Presently and permanently at Departamento de Física, Universidade Federal de Ouro Preto, Campus do Morro do Cruzeiro, 34500-000 Ouro Preto/MG, Brazil  
e-mail address: atb@iceb.ufop.br

## PADRÕES FRACTAIS DE CÉLULAS EM CULTURA

*Marcelo J. Vilela, Marcelo L. Martins\*, Daniel C. Vilela,  
Sidiney G. Alves\*, Tatiana A. Pimenta e Rosemary L. Mendes*

Departamento de Biologia Animal, Universidade Federal de Viçosa

\* Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG

Um dos mais agressivos fenômenos em biologia é o crescimento de células cancerosas. Apesar da extrema diversidade e complexidade das muitas observações e teorias relacionadas ao crescimento de células tumorais, ainda existem diversas lacunas nas descrições de tais mecanismos, especialmente com relação a geometria dos tumores. Recentemente alguns estudos se dedicaram à determinação das dimensões fractais de tumores "in vitro" e "in vivo" com o objetivo de entender o fenômeno de crescimento de células cancerosas e estabelecer características diagnósticas e prognósticas dessa patologia. O que se espera é que os padrões de crescimento tumorais reflitam parte das propriedades funcionais das células e de suas interações com o microambiente no qual elas vivem.

Neste trabalho observamos experimentalmente o crescimento de células tumorais derivadas de carcinomas humanos em culturas, nas quais o número inicial de células era da ordem de  $10^3$ . Uma vez que cada célula isolada ou pequeno grupo inicial de células se multiplica, movimenta-se e se agrega a outras colônias, formando grandes aglomerados fractais, a distribuição dos "clusters" gerados no processo de crescimento é, além da dimensão fractal, outro importante aspecto na caracterização desse fenômeno. Nossos resultados experimentais mostram que a função de distribuição de tamanho de clusters segue leis de potência tanto no tempo quanto no tamanho dos aglomerados.

Além disso propomos um modelo de crescimento de células em cultura no qual são incluídos os seguintes aspectos genéricos: (i) difusão dos fatores de crescimento celular (parácrinos e autócrinos); (ii) movimento das células e (iii) divisão ou reprodução celular. Através da simulação computacional desse modelo estudamos o comportamento da função de distribuição de tamanho de "clusters" e comparamos os resultados e padrões de crescimento obtidos com aqueles experimentalmente observados.

## BISTURI ÓPTICO PARA MANIPULAÇÃO DE CÉLULAS VIVAS

*A. Fontes, M. L. Redigolo, A.M. de Paula e C.L. Cesar*

Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6165, 13083-970  
Campinas, SP

*Palavras-Chave:* Bisturi óptico, células orgânicas, laser

Muitos pesquisadores têm se dedicado ao estudo de manipulação de partículas biológicas, com tamanhos variando entre décimos e centenas de micra. O controle de técnicas de transporte de suas organelas traria grandes avanços à genética. Mas para tal, furar as membranas celular e nuclear das células, sem danificá-las, torna-se fundamental. Com esse objetivo, foi desenvolvido o "bisturi óptico". Este, para ser eficiente, deve ter como principal componente um laser de alta potência que possibilite a produção de furos na parede celular, e deve ser pulsado para evitar que o dano térmico se propague para as células adjacentes. O nosso sistema experimental consiste em um laser pulsado de Nd:YAG, bombeado por um laser diodo na geometria TFR (Tightly Folder Resonator), o qual possui um comprimento de onda de 1064 nm. Como a luz infra vermelha não é fortemente absorvida pelos materiais orgânicos, se fez necessário o uso de um dobrador de frequência baseado em um cristal não-linear de  $\text{NbLiO}_3$ , alterando o comprimento de onda para 532 nm. Esse feixe é focalizado em um microscópio Olympus modelo CBA com objetivas 4, 10, 40 e 100X. Acoplamos ao mesmo uma mini-câmera JVC modelo TK 1085-U que possibilitou a gravação de imagens das células de cebola, material orgânico escolhido por nós devido a sua fácil visualização e permanência estática. O controle da incidência dos pulsos laser sobre a amostra foi feita através de um shutter eletrônico cujo tempo de abertura e fechamento é dado pela equação  $t=1,IRC$ . Com isso as membranas celulares foram perfuradas com o laser operando em uma frequência inferior a 2000 Hz e a uma corrente entre 9,0 A e 9,5 A. Seus núcleos foram evaporados em uma frequência também inferior a 2000 Hz e a uma corrente entre 9,5 A e 10,0 A.

## USO DA PINÇA ÓPTICA (OPTICAL TWEEZER) PARA MEDIDA DA DEFORMABILIDADE DA MEMBRANA DA HEMÁCIA

*R.R. Huruta\*, S.T.O. Saad\*, F.M. P. Silva\*\*, A.M. de Paula\*\* e C.L. Cesar\*\**

\*Faculdade de Ciências Médicas; \*\*Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas,  
Caixa Postal 6165, 13083-970, Campinas, SP

*Palavras-Chave:* pinça óptica, calibração, deformabilidade, hemácias

A pinça óptica, baseada na técnica de transferência de momentum de fótons para capturar e manipular partículas biológicas, foi desenvolvida por A.Ashkin *et al* em 1987. Desde então, a pinça óptica tem sido utilizada em estudos de genética molecular, fertilização assistida, dentre outros. Neste trabalho utilizamos a pinça óptica para estudar a deformabilidade da membrana da hemácia com o auxílio de um laser Nd:YAG, cujo feixe é focalizado num microscópio Olympus com um aumento de até 100 vezes. A hemácia (glóbulo vermelho ou eritrócito) na sua função de captar o oxigênio dos pulmões e levá-lo para todas as células através da hemoglobina, percorre todos os vasos sanguíneos do organismo por aproximadamente 500.000 vezes, durante sua vida média de 120 dias, atravessando uma distância de 250km. Além disso, transpõe capilares e sinusóides do baço com diâmetro de 3 a 4 micras, sendo que o diâmetro da hemácia é de 7 a 9 micras. Tais fenômenos só são possíveis se o glóbulo vermelho mantiver a integridade de suas principais propriedades: Deformabilidade e durabilidade celular. A perda ou diminuição da deformabilidade leva à uma retirada prematura das hemácias da circulação diminuindo a oferta de oxigênio; é o que ocorre, por exemplo, na anemia falciforme e esferocitose hereditária. Uma minicâmera JVC acoplada ao microscópio registra as imagens das hemácias capturadas. Essas imagens podem ser gravadas em VHS e no microcomputador, onde serão analisadas quantitativa e qualitativamente, quadro a quadro. Dentre as várias opções para a medida da deformabilidade optamos por duas: 1. Medida do período de oscilação: com a pinça promovemos uma máxima elongação da membrana e medimos o tempo de retorno da membrana à sua morfologia inicial, tendo-se uma medida indireta da deformabilidade; 2. Medida da deformação em função da velocidade num fluido: capturamos uma hemácia e a deslocamos sob velocidade constante contra um fluido e observamos sua deformação em função da velocidade, obtendo assim um outro parâmetro para a nossa calibração.

## ESTUDO DA CINÉTICA DE COMBUSTÃO DA CELULIGNINA

Christian A. Vieira<sup>1</sup>, Daltro G. Pinatti<sup>2</sup>, Munemasa Machida<sup>1</sup>, Carlos A. Ferrari<sup>1</sup>

1 Depto. de Eletrônica Quântica

2 Depto. de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais

Instituto de Física - UNICAMP

*Palavras-Chave:* combustão, celulignina, fotodeteção

A celulignina, sólido produzido a partir da pré-hidrólise ácida de madeira e similares, é uma mistura de celulose cristalina e lignina (amorfa). Este material é moído até que se obtenham partículas com diâmetro médio inferior a  $400\mu\text{m}$  que são, separadamente, fotografadas, pesadas com o auxílio de um microbalança e queimadas sobre uma lâmina de vidro, em ar atmosférico, com o auxílio de um laser de  $\text{Ar}^+$  ou  $\text{CO}_2$ . Registra-se a curva de intensidade luminosa em função do tempo, no processo de combustão, através de um fotodiodo SGD-444 e um osciloscópio. A região da lâmina de vidro onde se deu a combustão é posteriormente fotografada. São estudados dois tipos distintos de partículas: 1) cilíndricas, provenientes de regiões da madeira onde as fibras são dispostas quase que paralelamente e 2) esféricas, provenientes de nós da madeira. No primeiro caso, a densidade inicial da partícula ( $\rho_0$ ) é da ordem de  $0,22\text{g/cm}^3$  e a razão entre sua massa inicial e o tempo de combustão ( $m_0/t_c$ ) é da ordem de  $7\mu\text{g/s}$ ; no segundo caso,  $\rho_0 \approx 0,53\text{g/cm}^3$  e  $m_0/t_c \approx 6\mu\text{g/s}$ . Observa-se, a partir das fotos tiradas após a combustão, que a quantidade de sólido carbonizado e de líquidos condensados sobre a placa de vidro é maior no caso das partículas cilíndricas. Resultados dos ajustes das curvas de intensidade luminosa em função do tempo são apresentados, supondo-se radiação de corpo negro ponderada pela curva de resposta do fotodetector para os casos: 1) área da partícula ( $A$ ) constante e temperatura de superfície  $T_s$  variável com o tempo; 2)  $T_s$  constante e  $A$  variando com o tempo e 3)  $T_s$  e  $A$  como funções do tempo. Tais resultados permitem inferir sobre os processos envolvidos na combustão das partículas, tais como pirólise e carbonização. Estudos estão sendo feitos sobre a combustão em placa porosa e para partículas com diâmetro inferior a  $100\mu\text{m}$ .

## DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE FÓSFORO EM AMOSTRAS DE SOLO COM A TÉCNICA PIXE E AVALIAÇÃO DE SUA VARIABILIDADE ESPACIAL EM UM CAMPO AGRÍCOLA EXPERIMENTAL

Paulo Estevão Cruvinel<sup>1</sup>, Sílvio Crestana<sup>1</sup> e Paulo Eduardo Artaxo Netto<sup>2</sup>

(1) EMBRAPA-CNPDIA, Rua XV de Novembro 1452, São Carlos SP

(2) Instituto de Física da USP, Rua do Matão, Travessa R 187, Pinheiros, São Paulo-SP

*Palavras-chave:* pixe, nutriente, fósforo

A concentração de elementos-traço em plantas é frequentemente correlacionada com a abundância desses elementos em solos e rochas. Uma vez que a produção de alimentos e a qualidade do meio ambiente têm tido papel de destaque para o ser humano, um melhor entendimento do comportamento de elementos, elementos-traço e dos micronutrientes no sistema solo-planta mostra ser significativo. A abundância de elementos, elementos-traço e dos micronutrientes em solos governa a fonte apropriada destes elementos para os organismos vivos e, ademais, são de grande importância no meio ambiente. Neste trabalho medidas da concentração de fósforo em ( $\mu\text{g/g}$ ) em amostras de solo e um estudo da variabilidade espacial desse elemento em um campo agrícola de  $5000\text{ m}^2$  é apresentado com o uso da técnica de indução de raios X por prótons (PIXE), a qual vem sendo desenvolvida para uso na agropecuária. O solo utilizado nas análises foi coletado do campo C da Estação Experimental de Pindorama, a qual tem área de  $532,8\text{ ha}$  e situa-se na região sul do município de Pindorama, aproximadamente com coordenadas  $48^\circ 55' \text{ W}$  e  $21^\circ 13' \text{ S}$ . As amostras de solo analisadas pela técnica PIXE foram colhidas de diferentes locais do campo agrícola experimental com intervalos de 5 metros e a 15 centímetros de profundidade. A análise das amostras foi realizada no acelerador Pelletron série S, Modelo 5SDH, instalado no Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

( EMBRAPA-SEP PROJETO: 12.0.94.090)

## ESPECTROS DE EMISSÃO DO Rb V, VI E VII

*João Victor Boechat Gomide, Fernando Remigio Tamariz Luna, Antonio Trigueiros*  
Instituto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP

*Gildo de Holanda Cavalcanti*  
Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

**Palavras-Chave:** espectroscopia de emissão, ultra-violeta de vácuo, metais alcalinos

Apresentamos os espectros de emissão no ultra-violeta de vácuo do rubídio ionizado quatro, cinco e seis vezes, Rb V, Rb VI e Rb VII, respectivamente. Os espectros foram obtidos em placas fotográficas no espectrógrafo de incidência normal de dois metros de distância focal do Laboratório de Física Atômica e Molecular do Grupo de Plasmas do IFGW. A região espectral é de 300 a 2100 Å, com uma resolução de 4,6 Å/mm. O vapor de rubídio é introduzido em um theta-pinch acoplado ao espectrógrafo depois de aquecido em um forno, por efusão. Utilizamos o hélio como gás tampão.

Fizemos a leitura das placas em um microdensitômetro para determinar os comprimentos de onda das diversas transições. Em cada placa foram feitos espectros com variadas energias no theta-pinch para assinalar a que pertence a transição. Estes dados são analisados com o programa Hartree-Fock Relativístico Multiconfiguracional desenvolvido pelo Prof. Cowan. São calculadas as energias médias das configurações, os parâmetros de Slater, o parâmetro de acoplamento spin-órbita, as integrais de interação entre as configurações, o acoplamento que melhor se adapta aos cálculos, os níveis de energia, os comprimentos de onda e a probabilidade de transição. Este trabalho é continuação do projeto de espectroscopia no ultra-violeta de vácuo com vapores metálicos do Laboratório. Os resultados obtidos são relevantes pois eles são praticamente ausentes na literatura, apesar de sua importância para o diagnóstico de plasmas, astrofísica e ciência dos materiais.

(CNPq, FAPESP e FINEP)

## Espectroscopia de Absorção do Iodo com Lasers Semicondutores

F.Catalani, G.A.Garcia, A.Scalabrin, D.Pereira  
Instituto de Física-UNICAMP

**Palavras-chave:** Iodo, Laser, Diodo

A molécula de Iodo ( $I_2$ ) tem sido utilizada em diversos experimentos, demonstrando-se de fundamental importância na área de espectroscopia à alta resolução e metrologia. Isto se deve ao rico espectro roto-vibracional dessas moléculas, apresentando milhares de linhas catalogadas no visível e infravermelho próximo [1]. Além disso, o espectro hiperfino dessas transições apresentam larguras de linha super-estreitas (dezenas de kHz). Estudos teóricos dessas transições estabelecem uma boa base de entendimento sobre a Hamiltoniana de moléculas diatômicas, assim como são utilizadas para a estabilização de lasers. Diversas dessas transições foram sugeridas para a realização prática do metro pelo "Comité International des Poids et Mesures" [2]. Neste trabalho apresentamos dados de espectroscopia de absorção do  $I_2$  na região de 776 nm. Para isso utilizamos um laser de diodo operando em regime monomodo, numa cavidade com temperatura estabilizada em mK. Devido à baixa intensidade das transições do Iodo nessa região espectral, construímos um forno. Este forno opera em temperaturas de até 580 K, e contém uma cela de pyrex com um dedo frio onde é depositado Iodo metálico. Desta forma temos uma maior densidade de moléculas disponíveis para o experimento, com sinais de grande razão Sinal/Ruído (S/N) sendo observados.

### Referências

- 1- S. Gerstenkorn, P.Luc- "Atlas du Spectre D'Absorption de la Molecule D'Iode" - Éditions du CNRS- Paris (1978), et complement
- 2- Metrologia 19, 163 (1984)

## MAGNETIZATION INVERSION IN THE DILUTED LINEAR CHAIN ANTIFERROMAGNET $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{Mn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Cl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

C.C. BECERRA<sup>1</sup>, A. PADUAN-FILHO<sup>1</sup> and F. PALACIO<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física da Universidade de São Paulo-SP

<sup>2</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Aragon, Zaragoza, Espanha

*Palavras-Chave:* magnetization, antiferromagnet, diluted magnetic systems

The compound  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{Mn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Cl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  is a quasi-one-dimensional linear chain Heisenberg-like antiferromagnet. A three-dimensional ordering of the linear chain occurs at  $T_N = 4.12 \text{ K}$  ( $x = 0$ ).<sup>(1)</sup> In this paper we reports the effects of the substitution of the  $\text{Mn}^{2+}$  ion by  $\text{Cd}^{2+}$  in its magnetic properties at low fields. Samples with  $x = 0.005$  and  $0.01$  were investigated. Measurements were carried in a vibrating sample magnetometer with very small axial fields provided by a copper solenoid mounted coaxially with the pick-up coils of the magnetometer and through magnetic susceptibility ( $\chi$ ) measurements. As was previously reported in some three-dimensional antiferromagnets<sup>(2)</sup> we observed the appearance of a remanent magnetization ( $M_r$ ) below  $T_N$  when the sample is cooled through  $T_N$  in a small axial magnetic field. This occurs even for axial fields as low as few milli-Oe. We found that the magnitude of  $M_r$  is of the order of 1% of that for the sub-lattice magnetization. When the sample is cooled in axial fields lower than 20 mili-Oe then  $M_r$  shows an inversion point with the sign of  $M_r$  reversing at a temperature closer but below  $T_N$ . A similar behavior is observed in some classes of ferrimagnetic materials where each sub-lattice has a different temperature dependence of its magnetization. The  $\chi$  vs T measurements shows two strong singularities: one at  $T_N$  and the second at the temperature where the inversion point occurs. We discuss and compare these results with those previously observed in some diluted three-dimensional antiferromagnets.

1. A. Paduan-Filho and N. F. Oliveira Jr, J. Phys. C 17, L857 (1984)

2. C. C. Becerra, A. Paduan-Filho, T. Fries, Y. Shapira and F. Palacio, J. Phys.; Condens. Matter 6, 5724 (1994).

(CNPq, CCInt-USP, FAPESP, FINEP)

## REMNANT MAGNETIZATION AND RANDOM FIELD BEHAVIOR IN DILUTED

$\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{F}_2$  ( $x = 0.57; 0.28$ )

H. J. Brumatto<sup>1</sup>, C.C. Becerra<sup>1</sup>, A. Paduan Filho<sup>1</sup> and F. Montenegro<sup>2</sup>

1- Instituto de Física - Universidade de São Paulo (USP)

2- Universidade Federal de Pernambuco ( UFPE)

*Keywords:* random fields, diluted antiferromagnets, magnetization

Magnetization measurements as a function of temperature (T) were carried in single crystals of the diluted uniaxial antiferromagnet  $\text{Fe}_{1-x}\text{Zn}_x\text{F}_2$  ( $x = 0.57; 0.28$ ). When the samples are cooled through their Néel temperature ( $T_N$ ) in the presence of a small applied magnetic field H (~1 Oe) a magnetization appears below  $T_N$  along the direction of the applied field. This magnetization remains after H is removed. This remanent magnetization ( $M_r$ ) was observed when H is either along the easy axis or perpendicular to it. The size of  $M_r$  for very low fields ( $H < 1 \text{ Oe}$ ) depends on H but it saturate for fields of the order of few Oersteds. We also found that  $M_r$  for a given small applied field vary from run to run provided that the sample was warmed to room temperature between runs. The expected random field (RF) behavior with the presence of an excess magnetization  $\Delta M = M_{FC} - M_{ZFC}$ , between magnetization measurements made using the Field Cooled (FC) and Zero Field Cooled (ZFC) procedures, is observed when H is applied along the easy axis but only for fields exceeding 1 Tesla. In order to make a correct analysis of the RF behavior  $M_r$  should be taken into account since for example at 20 K for the sample with  $x=0.57$ ,  $\Delta M$  for  $H=2$  Tesla is comparable to  $M_r$ . The field dependence of  $\Delta M \sim H^\delta$  was measured up to 8 Tesla at fixed T below  $T_N$ . For  $x=0.28$ ,  $\delta$  is close to 2 at T close to  $T_N$  and increases to 4.5 at  $T=6 \text{ K}$ . The possible origins of the remanent magnetization and observed RF behavior will be discussed.

## COMPORTAMENTO CRÍTICO DA SUSCEPTIBILIDADE NÃO-LINEAR

*Ulisses Azevedo Leitão e Agostinho A. G. Campos*

Universidade Federal de Minas Gerais - Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Física

*Palavras-Chave: Teoria de escala, Magnetização, Comportamento Crítico*

A análise do comportamento de escala em sistemas Ising antiferromagnéticos demonstra a existência de divergência crítica da susceptibilidade não-linear na temperatura de Néel. Para tanto, é necessário a presença de um campo relevante, não-ordenante, associado ao crossover de comportamento crítico. Este tipo de análise de escala foi usado para descrever o comportamento crítico de sistemas magnéticos diluídos,<sup>1</sup> nos quais se observa o crossover de comportamento crítico de sistemas com interações aleatórias para comportamento crítico de sistemas com campos aleatórios. Muito recentemente, este tipo de análise foi utilizada na interpretação do comportamento crítico da susceptibilidade não-linear em sistemas Ising puros<sup>2</sup> com ponto tricrítico.

Demonstra-se que este tipo de análise e interpretação no caso do sistema puro não é indiscutível, tendo em vista que a expansão da energia livre: *i)* foi realizada em torno da temperatura de Néel,  $T_N$ , e não da temperatura tricrítica,  $T_T$ , e *ii)* envolve um campo *irrelevante*, campo magnético homogêneo  $H$ . Foram realizadas medidas de magnetização em  $K_2CoF_4$ , um sistema Ising puro, antiferromagnético bidimensional, com o objetivo de testar a hipótese da necessidade da existência de um campo relevante associado ao comportamento crítico da susceptibilidade não-linear.

1) U. A. Leitão e W. Kleemann, Europhys. Lett. 5 (1988) 529.

2) J. Kusshauer e W. Kleemann, J. Phys. C 7 (1995) L1.

## CÁLCULO DA ESTABILIDADE DAS FASES DO MODELO DE DILUIÇÃO CORRELACIONADA E DIRECIONADA.

*L. B. Bernardes, P. C. Facin, A. S. M. de Castro e Jeremias B. da Silva.*  
Departamento de Física -UEPG-PR.

*Palavras-Chave: diluição correlacionada, árvore de Cayley, energia livre*

Neste trabalho estudamos os diagramas de fase e a energia livre do modelo de diluição temperada de sítios e ligações correlacionadas e direcionadas, introduzido para explicar o comportamento magnético de um cristal magnético, tipo Heisenberg,  $KNi_2Mg_{1-x}F_3$ . Nesse modelo a interação de intercâmbio entre dois átomos magnéticos depende da ocupação magnética dos sítios vizinhos ao longo da reta que une o par. Estudamos o modelo na árvore de Cayley assimétrica fechada, na qual a interação de intercâmbio depende do sítio vizinho anterior ao par e dos vizinhos subsequentes. O valor da interação depende do parâmetro ajustável  $\alpha$  que pode ser positivo (interação ferromagnética) e negativo (interação antiferromagnética).

Nós usamos a técnica de "spin-fantasma" para simular um campo externo aplicado à superfície da árvore, possibilitando o cálculo da relação de recorrência para o parâmetro de ordem nas aproximações de Bethe-Peierls e Bragg-Williams. O diagrama de fase é construído a partir da solução numérica da relação de recorrência para o parâmetro de ordem. Calculamos a integral da magnetização, que nos fornece o funcional da energia livre, o que nos possibilitou determinar a estabilidade das fases do diagrama.

No diagrama de fases, para  $\alpha$  positivo surgem apenas as fases ferromagnética e paramagnética, enquanto para  $\alpha$  negativo o modelo apresenta ainda as fases vidro de spin e antiferromagnética. Nós analisamos o comportamento do parâmetro de ordem e da energia livre em relação à temperatura e à diluição correlacionada e direcionada de sítios. Dessa forma, mostramos a estabilidade das fases obtidas no diagrama de fases.

## THERMALLY ACTIVATED QUANTUM TUNNELING IN NANOSCOPIC ORGANOMETALIC CLUSTERS

Miguel A. Novak, Angelo M. S. Gomes, Walter S. D. Folly.  
Instituto de Física da U.F.R.J.

**Palavras chave:** Tunelamento Quântico, Superparamagnetismo, Relaxação Magnética.

New Ac complex susceptibility measurements under Dc fields on powder and single crystal samples of  $Mn_{12}$  organic molecular crystals provide evidences of Quantum Tunneling of the Magnetization at the nanoscopic level. The tunneling occurs between two macrostates defined by the magnetization of the isolated clusters formed by 12 exchange correlated Mn atoms in its strong uniaxial anisotropy field. Two different crystals based on Acetate and Benzoate  $Mn_{12}$  molecules with tetragonal and orthorhombic symmetries, with groundstates  $S=10$  and  $S=9$  groundstate respectively were studied. Both behaves as a prototype superparamagnet with high anisotropy presenting an apparent mono exponential decay of the remanent magnetization. The relaxation time measured by both Ac susceptibility and time dependence of the remanent magnetization decay has an Arrhenius behavior  $\tau = \tau_0 e^{\Delta/kT}$  with  $\Delta/k_B \sim 64K$  for the Ac and  $68K$  for the Bz complex. A closer analysis of the relaxation time dependence with temperature and Dc magnetic field reveal small deviations from pure thermal activation and a classically unexpected field dependence with structures attributed to resonant tunneling. Both effects are explained with a simple double well model where quantum tunneling of the magnetization occurs between the  $\pm m_z$  states of each well by pure quantum tunneling for the groundstates, by classical thermal activation as well as thermally activated quantum tunneling for the excited states, each process dominating in a certain temperature range. This model also explains the low values of the attempt switching frequency ( $1/\tau_0$ ) and the discrepancies observed between the anisotropy energy values obtained by EPR and other techniques.

(Finep, CNPq)

## Quantum Tunneling and Blocking Effects of Magnetization in $Mn_{12}$ Complex Compounds Observed by Specific Heat

Gomes, A. M. e Novak, M. A.  
Dept. Física dos Sólidos, Instituto de Física - UFRJ

**Palavras-Chave:** superparamagnetism, specific heat, quantum tunneling

We have studied the  $Mn_{12}R$  clusters recently reported as ideal superparamagnet due to monodispersion of sizes and anisotropy barriers. Effects associated to quantum tunneling of magnetization are also confirmed to occur at low temperatures. These clusters form molecular crystals with a core formed by 12 manganese interacting atoms well isolated from other clusters through organic radicals R surrounding the magnetic cluster. A high spin two-fold degenerated ground state,  $S=10$  for  $Mn_{12}Ac$  and  $S=9$  for  $Mn_{12}Bz$ . Local anisotropy on some Mn site are responsible for a high uniaxial anisotropy barrier,  $\Delta E = KV \sin^2 \theta$ , observed in single crystal high field magnetization and dynamical susceptibility relaxation measurements. These clusters follow a well defined Arrhenius law for relaxation of the magnetization,  $\tau = \tau_0 \exp(\Delta E/k_B T)$  at temperatures above 3 K. In zero field,  $\Delta E/k_B = 64$  K for  $Mn_{12}Ac$  and  $\Delta E/k_B = 69$  K for  $Mn_{12}Bz$ , the pre-factor  $\tau_0$  is approximately the same order for both,  $\tau_0 = 10^{-7}$  s. We have performed specific heat measurements with a home build automated semiadiabatic calorimeter, under zero and 0.2 T static field. From specific heat data, it is shown that the expected Schottky contribution due to zero field splitting is not compatible with the above anisotropy barrier values for  $Mn_{12}Ac$  complex. This can only be explained by assuming quantum tunneling of magnetization, which increases the relaxation rate behaving as it had a smaller anisotropy barrier. Data in applied field show, for the first time, a new effect associated to the blocking of the magnetization in a superparamagnetic material starting around 3 K, where the time scale of the measurements is comparable to the relaxation of the magnetization. Calculated Schottky contribution due to the applied field is used to compare the expected behavior and the experimental one.

## ESTABILIDADE TÉRMICA DE NANO-ESTRUTURA DE CARBONO

*Gilberto de Paiva, Pedro Venezuela, Sylvio Canuto e Adalberto Fazio*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* fullerenos, nanotubos, simulação

Apesar do grande número de trabalhos científicos publicados nesta década envolvendo fullerenos, não conhecemos nenhum estudo detalhado sobre o efeito da agitação térmica nesses materiais, embora eles sejam produzidos em altas temperaturas. Nós realizamos simulações para estudar o comportamento térmico das várias formas geométricas em que esses sistemas podem se apresentar, plana (grafite), esférica (fullerenos) e cilíndrica (nanotubos), para fazermos comparações de estabilidade dessas diferentes estruturas. Alguns dos sistemas relevantes para o estudo desses materiais possuem da ordem de 1000 átomos, e até agora só foram tratados em sub-regiões localizadas. Nós fizemos simulações de Monte Carlo com sistemas contendo até 1600 átomos, utilizando o potencial empírico de Tersoff, aumentando a temperatura de 0K a 8000 K em steps de 500 K. Caracterizamos o comportamento térmico geral dessas estruturas de carbono. Esses materiais são destruído em diferentes temperaturas, e nós determinamos os parâmetros cuja variação caracteriza a quebra dessas estruturas.

Fizemos um estudo sistemático das diferentes formas e dimensões desses sistemas, e obtivemos que os fullerenos e nanotubos são menos estáveis termicamente que a folha de grafite finita, em desacordo com outros trabalhos que não incluíam o efeito da temperatura. Esse resultado fornece novas informações a respeito do processo de crescimento desses materiais, particularmente com relação aos nanotubos, e sugere a possibilidade de se separar fullerenos e nanotubos com determinadas características geométricas utilizando um tratamento térmico.

Nós também estudamos a interação de átomos de hidrogênio na superfície desses materiais, simulando uma atmosfera contendo o gás hidrogênio, onde a temperatura de quebra diminui de aproximadamente 1000 K. Este efeito está de acordo com os resultados experimentais com nanotubos, e nos permite discutir algumas particularidades a respeito de processos como o "Chemical Vapor Deposition" (CVD).

## EFEITOS DIMENSIONAIS DOS PARÂMETROS DE REDE E EXPANSIVIDADE TÉRMICA DE NANOPARTÍCULAS DE C<sub>60</sub>

*Viatcheslav Ivanovich Zubov, Igor Mamontov, José Nicodemos Teixeira Rabelo*  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás

*Palavras-Chave:* fullereno, nanofase, anarmonicidade

Os materiais nanoestruturados são uma classe importante de sistemas com nanofase, i.e. sistemas com estrutura ultrafina. Estes sistemas consistem de porções cujas dimensões são comparáveis com o comprimento de correlação de alguns fenômenos físicos ou com o caminho livre médio das excitações coletivas. São exemplos de nanofase os pós ultrafinos, filmes finos, granulares, whiskers, materiais porosos, etc. Sua particularidade é a dependência de suas propriedades com relação ao tamanho dos fragmentos. Usamos a teoria estatística das propriedades estruturais, dinâmicas e termodinâmicas dos cristais anarmônicos e das partículas finas<sup>1,2</sup>, para investigar os efeitos dimensionais em nanopartículas do fullereno sólido com rede cúbica de faces centradas. Nos cálculos utilizamos um potencial intermolecular obtido por Girifalco<sup>3</sup>. Nós consideramos tres formas altamente simétricas de partículas com faces singulares: cúbica, esférica e octaédrica, e calculamos as dependências dimensionais de seus parâmetros de rede médios  $a$  e dos coeficientes de expansão térmica  $\alpha$ . Levamos em consideração a influência da tensão superficial e da relaxação da rede perto das superfícies. Para todas as tres formas de nanopartículas, tanto o parâmetro de rede médio como o coeficiente de expansão térmica experimentam um aumento na medida em que diminuimos o tamanho da partícula. Este efeito é uma consequência da anarmonicidade das vibrações das moléculas do fullereno, e ele se intensifica apreciavelmente com o aumento da temperatura. Notamos também uma contribuição dominante da relaxação da rede nos efeitos de dimensão.

1. V.I. Zubov, I.V. Mamontov and N.P. Tretiakov, Int. J. Mod. Phys. B6, 197(1992)

2. V.I. Zubov, N.P. Tretiakov and J.N. Teixeira Rabelo, Appl. Surf. Sci. (1995)

3. L. A. Girifalco, J. Phys. Chem. 96, 858(1992)

(CNPq)

## ESTUDO DA FASE INCOMENSURÁVEL DE ALTA TEMPERATURA DO CRISTAL $LiKSO_4$ POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X

D. R. Ventura, N. L. Speziali and M. A. Pimenta  
*Departamento de Física, ICEx- UFMG*  
*Belo Horizonte 30161-970 Brazil*

Sulfato de lítio e potássio apresenta uma interessante sequência de fases estruturais de alta temperatura. Uma delas, a que vai de 435 à 670°C, gerou controvérsias entre vários autores e ainda não tem sua estrutura estabelecida.

Neste trabalho esta fase é estudada por difração de raios X. Fotografias de precessão nesta fase mostraram que as camadas de  $l$  ímpar apresentam um número de reflexões maior que as camadas de  $l$  par pares e que estas reflexões são satélites. Resultados de fotografias de precessão com pressão axial aplicada em diferentes direções revelam que o cristal pode ser descrito por três domínios ferroelástico orientado de 120° um em relação ao outro. Medidas das reflexões satélites feitas no difratômetro a 4-círculos e revelaram que o cristal nesta fase é incomensurável. Cada um dos três domínios ferroelásticos pode ser descrito por um simples vetor de modulação do tipo  $l-q$ , com  $q = \chi a^*$ .

Medidas e cálculos com o objetivo de determinar a estrutura do cristal nesta fase estão em andamento.

## ANÁLISES QUANTITATIVA E ESTRUTURAL NOS MATERIAIS CERÂMICOS PZT E PZN. ESTRUTURA CRISTALINA DO PZN PEROVSKITA

C. O. Paiva-Santos, A. V. C. Andrade, C. F. Oliveira, T. Mazon, M. A. Zagute, J.A. Varela  
Instituto de Química de Araraquara - UNESP

*Palavras-Chave: método de Rietveld, estrutura cristalina, difração de raios X*

Amostras de  $PbZr_{0,45}Ti_{0,55}O_3$  (PZT) puras e dopadas com 5, 10 e 15% molar de nióbio foram preparadas por rota química com o objetivo de verificar a influência do dopante na estrutura cristalina e na proporção das fases formadas. O método de Rietveld de refinamento de estruturas cristalinas foi utilizado na identificação, quantificação e análise estrutural das fases presentes. Foram observadas as fases tetragonal e romboédrica do PZT,  $ZrO_2$  tetragonal e  $Pb_2Nb_2O_7$  pirocloro com proporções variando com a porcentagem de dopante. As análises parecem indicar que o dopante ocupa preferencialmente o sítio do Zr no PZT tetragonal. Amostras de zinco niobato de chumbo (PZN) dopadas com 3% molar (PZN3) e 7% molar (PZN7) de Ba, também preparadas por rota química, foram analisadas por difração de raios X com o objetivo de estudar a influência do dopante na proporção das fases perovskita e pirocloro do PZN. Para a análise quantitativa de fases pelo MR foi determinada a estrutura do PZN perovskita (GE R3m,  $a = 5,7252 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,0152 \text{ \AA}$ ,  $Z=3$ ). As intensidades dos picos de difração foram obtidas pelo método de LeBail, e os mapas de Patterson e Fourier diferença foram realizados com o programa SHELX-76. Os refinamentos das estruturas de todas as fases presentes nas amostras foram realizados com os programas DBWS9411 e FullProf. Com essa estrutura determinada, encontrou-se 13% em massa para a fase perovskita no PZN3 e 34% no PZN7.

(FAPESP, PICD-CAPES, CNPq)

## CÁLCULO DAS PROPRIEDADES DINÂMICAS DE UM CRISTAL ANARMÔNICO COM REDE FCC

*Montserrat Freixa Pascual, Clóves Gonçalves Rodrigues, Viatcheslav Ivanovich Zubov*  
Departamento de Física-Universidade Federal de Goiás - GO

*Palavras-Chave:* cristais anarmônicos, rede fcc, correlações

Investigamos as propriedades dinâmicas de um cristal anarmônico, utilizando o Método Correlativo Não Simetrizado do Campo Autoconsistente<sup>1</sup> (CUSF). Neste trabalho, calculamos os Momentos de Correlação Interatômica (QCM) e os Desvios Relativos Quadráticos Médios (MSRD) dos deslocamentos atômicos entre os vizinhos mais próximos de um modelo de cristal com rede cúbica de face centrada, levando em consideração as aproximações de fraca e forte anarmonicidade. Na aproximação harmônica, estas propriedades são proporcionais à temperatura. Os termos anarmônicos de terceira e quarta ordens são tratados como correções pequenas para o caso da aproximação de fraca anarmonicidade, resultando QCM e MSRD numa dependência quadrática em relação à temperatura. Utilizamos o potencial interatômico de Morse para uma análise numérica dos resultados. Estes são comparados com os de uma rede cúbica simples e com os de modelos bidimensionais com rede quadrada e hexagonal obtidos recentemente<sup>2</sup>. Como regra, as correlações entre os deslocamentos atômicos longitudinais são menores numa rede cúbica de face centrada do que numa rede cúbica simples, já que o número de coordenação está relacionada com a correlação na rede. A dimensionalidade da rede também influencia nas propriedades dinâmicas de redes anarmônicas. É interessante observar que a rede hexagonal bidimensional é um caso particular da rede FCC, assim como a rede quadrada é um caso particular da rede SC. Para temperaturas altas, a anarmonicidade afeta significativamente as propriedades aqui estudadas.

1. V. I. Zubov, M. F. Pascual, and J. N. Teixeira Rabelo, *phys. stat. sol. (b)*, 175, 331 (1993).

2. M. F. Pascual, V. I. Zubov, *Mod. Phys. Lett. B*9, 1513 (1995).

(CAPES, CNPq)

## Measurement of the complex nonlinear refractive index of $\text{Er}^{+3}$ and $\text{Nd}^{+3}$ doped glasses

M. Baesso<sup>a</sup>, T. Catunda, Y. Messaddeq<sup>b</sup> and M.A. Aegerter

Instituto de Física de São Carlos, USP, C.P. 369, 13560-970, São Carlos, SP, Brasil

In this work we measured the complex nonlinear refractive index  $n_2 = n_2' - i n_2''$  of  $\text{Er}^{+3}$  doped fluorindate and  $\text{Nd}^{+3}$  doped  $\text{InSbZnGd}$  glasses. In ion doped solids a resonant  $n_2$  appears when the laser pumps one of the ion excited states, so the refractive index change is proportional to the excited state population  $N_{ex} \propto I/I_s$ , where  $I$  is the laser intensity and  $I_s$  the transition saturation intensity. Two main different effects contribute to  $n_2'$ : Population Lens (PL) and Thermal Lens (TL). PL is caused by the polarizability difference  $\Delta\alpha$  between excited and ground states. The PL response time is given by the ion excited state radiative lifetime  $\tau_0$ . TL is caused by the deposition of heat via non-radiative decay process after the laser energy has been absorbed by the sample. The TL response time is given by  $\tau_{th} = \omega^2/4D$ ,  $D = K/\rho c$ , where  $\rho$  is the density,  $c$  is the specific heat,  $K$  is the thermal conductivity and  $\omega$  the laser beam waist. As the two response times are different the use of time resolved techniques permits the distinction between the PL and TL effects. We have used the time resolved Z-scan technique with an Ar ion laser. For the 1% doped  $\text{Nd}^{+3}$  sample we obtained  $n_2 = (-5.4 + 0.02i) \times 10^{10} \text{ cm}^2/\text{W}$  at 514.5nm. In this sample we observed response time much longer than  $\tau_0 \sim 500\mu\text{sec}$  so we concluded that TL is the dominant nonlinear mechanism. By fitting the transient signal with the TL expression we obtained  $D = 2.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{seg}$  and  $(ds/dT) = -0.5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ . For the 1% doped Er sample we obtained  $n_2 = (-1.40 + 0.013i) \times 10^9 \text{ cm}^2/\text{W}$  at 488nm. Although the population dynamics of  $\text{Er}^{+3}$  is much more complicated we believe that PL is also the dominant contribution for this sample.

(a) - Universidade Estadual de Maringá, Dep. de Física

(b) - Instituto de Química, UNESP - Araraquara

## Espectroscopia Ótica de Vidros Fluoroindatos dopados com $\text{Gd}^{+3}$

C.T.M. Ribeiro, L.A.O. Nunes, Y. Messaddeq\*

Instituto de Física de São Carlos-USP

\*Instituto de Química de Araraquara-Unesp

**Palavras-Chave:** Espectroscopia, Fluoroindatos, Gadolinio

Os vidros fluoroindatos apresentam uma larga faixa de transparência ótica que se estende do ultravioleta até o infravermelho, mostrando baixa dispersão sobre uma larga região espectral. Essas características dos vidros fluoretos, os tornam boas matrizes para colocarmos íons terras raras para aplicações óticas. Os vidros fluoroindatos foram estudados dopados com vários íons terras raras mostrando baixa absorção multifonon, o que aumenta a faixa de espectroscopia. Neste trabalho, estudamos vidros fluoroindatos dopados com íons  $\text{Gd}^{+3}$ . O íon  $\text{Gd}^{+3}$  apresenta uma estrutura de níveis bastante diferente dos demais íons terras raras, com todos os níveis óticamente ativos localizados no ultra violeta. O seu primeiro nível óticamente ativo está próximo de  $32000\text{cm}^{-1}$  acima do fundamental. Obtivemos espectros de absorção e emissão em vidros com composição básica  $40\text{InF}_3\text{-}32\text{ZnF}_2\text{-}25\text{BaF}_2\text{-}4\text{NaF}\text{-}0.5\text{AlF}_3\text{-}0.5\text{YF}_3$ , dopados com  $\text{Gd}^{+3}$  na forma  $\text{GdF}_3$  em substituição ao  $\text{ZnF}_2$ , nas concentrações de 2, 4, 10 e 20% mol. Através do espectro de absorção foi possível identificar as transições para o nível fundamental  $^8\text{S}_{7/2}$  dos níveis  $^6\text{P}$  e  $^6\text{I}$ , não sendo possível observar as transições para o fundamental das transições  $^6\text{P}_{3/2}$  devido a baixa intensidade e das transições  $^6\text{D}$  que se encontram em torno de  $40000\text{cm}^{-1}$  região de absorção do vidro fluoroindato. Nas medidas de luminescência foram identificadas à temperatura ambiente as transições  $^6\text{P}_{7/2}$ ,  $^6\text{P}_{5/2}$ ,  $^6\text{I}_{7/2}$  e  $^6\text{I}_{9/2}$  para o nível fundamental e à temperatura de  $\text{N}_2$  líquido foram detectadas apenas as transições  $^6\text{P}_{7/2}$  e  $^6\text{I}_{7/2}$  indicando processo de termalização no sistema. As medidas de tempo de decaimento radiativo foram feitas nas temperaturas ambiente e temperatura de  $\text{N}_2$  líquido mostrando o mesmo comportamento para a transição  $^6\text{P}_{7/2} \rightarrow ^8\text{S}_{7/2}$  em ambas as temperaturas. As propriedades óticas foram determinadas usando teoria de Judd-Ofelt com resultados em concordância com os dados experimentais.

(CNPQ, FAPESP)

## EMISSÃO NO AZUL E NO ULTRAVIOLETA POR CONVERSÃO ASCENDENTE DE ENERGIA EM VIDROS FLUOROINDATOS DOPADOS COM Nd<sup>3+</sup>

*L. H. Acioli, J.-G. Tian, Cid B. de Araújo*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Y. Messaddeq and M.A. Aegerter*

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** íons de terras raras, vidros fuoroindatos, conversão ascendente de energia

Vidros fluorados dopados com íons de Terras Raras (TR) têm sido objeto de crescente interesse para uso em amplificadores ópticos, conversores de frequência e sensores. Os vidros fluoroindatos são particularmente promissores por causa de sua janela de transparência (250 nm a 8 µm), pouca susceptibilidade à umidade, e a capacidade de incorporar grandes concentrações de íons de TR. Esta matriz é eficiente para a conversão ascendente de frequências usando tanto Er<sup>3+</sup> [1] quanto Pr<sup>3+</sup> [2] como íons ativos. Apresentamos aqui a observação experimental de uma emissão intensa no violeta e no azul de um vidro fluoroindato dopado com Nd<sup>3+</sup> bombeado pelo segundo harmônico de um laser (ps) de Nd:YAG. A amostra é preparada de acôrdo com o procedimento descrito nas referências [1,2]. Observamos as seguintes transições:  $^4D_{3/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$  ( $\approx 357$  nm);  $^4D_{3/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$  e  $^2P_{3/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$  ( $\approx 381$  nm);  $^4D_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  e  $^2P_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  ( $\approx 413$  nm); e  $^4D_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$  e  $^2P_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$  ( $\approx 448$  nm). A dependência do sinal de fluorescência com a intensidade do laser de excitação indica que dois fótons do laser incidente participam do processo, em todas as transições. Absorção de estado excitado e transferência de energia entre pares de íons de TR dão origem às emissões observadas aqui. Estudamos também a possibilidade de obter operação laser em 413 nm.

[1] de Araújo et al., Appl. Phys. Lett. 68, 602 (1996)

[2] de Araújo et al., Phys. Rev. B 50, 16219 (1994)

## GAS-SOURCE MOLECULAR-BEAM EPITAXY GROWTH OF STRAINED InAsP/InGaAsP QUANTUM WELL STRUCTURES FOR 1.3 $\mu$ m LASER DIODES

A.A. Bernussi<sup>‡</sup>, P. Thiagarajan<sup>†</sup>, H. Temkin<sup>†</sup>, and G.Y. Robinson<sup>†</sup>

<sup>‡</sup> CPqD - Telebras, Campinas, SP 13088-061, Brazil

<sup>†</sup> Electrical Eng. Department, Colorado State University, Ft. Collins CO 80523, USA

**Keywords:** InAsP/InGaAsP, quantum wells, laser diodes.

Quaternary InGaAsP alloys have been used as the material choice for laser diodes emitting at the wavelength of 1.3 $\mu$ m. Multiple quantum well lasers based on these materials exhibit very good electro-optic characteristics. However, the small conduction-band offset in this system causes electron overflow from the quantum wells that degrades the performance of such devices. InAsP/InGaAsP quantum wells, on the other hand, have a larger conduction-band offset compared to InGaAsP/InP heterostructures. The larger conduction-band offset in InAsP/InGaAsP system results in better carrier confinement and consequently lower threshold current density is expected. This work reports the optimization of growth conditions for InAsP/InGaAsP multiple quantum well structures by gas-source molecular-beam epitaxy. Photoluminescence, photocurrent and double crystal x-ray diffraction measurements were used to evaluate the optical and structural quality of these layers. Measurements of photoluminescence intensity and threshold currents of highly compressive strained ( $\Delta a/a \sim 1.6\%$ ) InAsP/InGaAsP quantum wells indicate an optimum growth temperature ( $T_g = 415^\circ\text{C}$ ) substantially lower than conventional 1.3 $\mu$ m InGaAsP layers. Broad area laser structures grown at the optimum conditions exhibited threshold current densities as low as 400 A/cm<sup>2</sup>. Buried heterostructure devices showed threshold currents of 5.0 mA, typical slope efficiencies of 0.25 W/A (per facet) and internal losses of 8.0 cm<sup>-1</sup>. The performance achieved by these devices clearly demonstrates the high quality InAsP/InGaAsP materials grown by gas-source molecular-beam epitaxy.

## 2-DIMENSIONAL SPATIAL LAPLACIAN BY USE OF ANALOG DIFFERENTIAL SELF-ELECTROOPTIC EFFECT DEVICE

E. A. De Souza and D. A. B. Miller

UNICAMP-IFGW-DEQ, C.P. 6165, Campinas, SP, Brazil, 13081  
Tel. (016) 239-8312; Fax. (016) 239-3136, e-mail: thoroh@ifi.unicamp.br

**Palavras-chave:** Quantum-well, Modulator, Image Differentiation.

We demonstrate a spatial image differentiation in 2-dimensions by use of analog differential self-electrooptic effect device (SEED). The device is an intrinsic optoelectronic circuit integrating detectors and modulators. The detector is a 3x3 array in parallel with a pair of quantum well diodes in series. The photocurrent generated by the array is injected in the midpoint between the quantum well diodes. It was design in such way that the net photocurrent generated for it is zero for images having constant or linear spatial intensity profile. The output from the device is a pair of power supply beams reflected back from the quantum well modulator. By taking the difference between them the 2-dimensional spatial Laplacian is obtained.

(Bell Laboratories, CNPq)

## ESTRUTURA MQW DE InGaAs/InGaAsP/InP PARA LASER DE 1.55 $\mu\text{m}$

M.T.Furtado, W.Carvalho Jr., M.S.S.Loural, A.C.Lamas, C.F.Souza, C.M.A.Coghi,  
E.J.T.Manganote e A.C.G.Bordeaux-Rêgo  
CPqD-TELEBRÁS, C.P.1579, Campinas 13.088-061, SP.

*Palavras-Chave:* poços quânticos, compostos III-V, dispositivos optoeletrônicos

Os dispositivos lasers semicondutores constituídos de camada ativa com uma estrutura de poços quânticos múltiplos (MQW) apresentam um grande interesse em telecomunicações. Na janela óptica de 1.55 $\mu\text{m}$ , as estruturas MQW de InGaAs/InGaAsP/InP tem demonstrado um excelente desempenho em alta velocidade (1) visando a aplicação em sistemas ópticos de longas distâncias. Neste trabalho descreveremos um estudo preliminar de uma estrutura de confinamento óptico separado SCH-MQW contendo 5 poços de InGaAs separados por barreiras de InGaAsP crescidos por MOCVD com o mesmo parâmetro de rede do substrato de InP. A espessura dos poços, barreiras e camadas quaternárias de confinamento óptico separado são de 70Å, 100Å e 1000Å, respectivamente, e a composição do material quaternário nas barreiras e camadas confinantes corresponde ao comprimento de onda de emissão banda-banda em 1.3 $\mu\text{m}$ . A espessura dos poços é ajustada para a emissão em 1.55 $\mu\text{m}$  da transição fundamental entre as primeiras sub-bandas ( $n=1$ ) dos elétrons na banda de condução e buracos pesados na banda de valência, respectivamente, mostrando um bom acordo entre os cálculos efetuados com a teoria da massa efetiva (2) e as medidas de fotoluminescência e difração de raios X. Discutiremos o efeito térmico da interdifusão na estrutura MQW que ocorre durante o recrescimento epitaxial necessário ao processamento de uma camada ativa enterrada, visando a fabricação de lasers de alta velocidade. A densidade de corrente limiar  $j_l$ , média medida em dispositivos lasers de área larga (*broad area*) com comprimentos de cavidade  $L=200-900\mu\text{m}$  variou de 1.2-2.5KA/cm<sup>2</sup>. Apresentaremos uma maneira simples de se estimar o ganho diferencial à partir das medidas de  $j_l(1/L)$ , obtendo-se o valor de  $6.8 \times 10^{-16} \text{cm}^2$  ( $L=200\mu\text{m}$ ) em boa concordância com a literatura. Dispositivos lasers processados com a estrutura *ridge waveguide* apresentaram baixas correntes limiares de 23-25mA ( $L=300\mu\text{m}$ ) e boa linearidade.

(1) K.Uomi, M.Aoki, T.Tsuchiya and A.Takai, *IEEE J.Quantum Electron.* 29, 355 (1993).

(2) M.T.Furtado, *Braz.J.Phys.* 24, 466 (1994).

## DIFUSIVIDADES ORIENTACIONAIS MEDIDAS POR ESPALHAMENTO RAYLEIGH EM UMA FASE NEMÁTICA CALAMÍTICA ( $N_C$ ) DE UM CRISTAL LÍQUIDO LIOTRÓPICO

M.B. Lacerda Santos e M.A. Amato

Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910-900 Brasília, DF

**Palavras-chave:** flutuações orientacionais, correlação de fótons, escoamentos induzidos

Usando uma técnica de batimento óptico, realizamos medidas do tempo de decaimento de flutuações térmicas do diretor nemático para a fase cilíndrica ou calamítica ( $N_C$ ) do sistema liotrópico K-laurato/ decanol/  $D_2O$ . As concentrações relativas correspondem a uma região do diagrama de fase desse sistema exibindo a fase  $N_C$  em ampla gama de temperatura, e as medidas foram realizadas longe de transições de fase. Variando-se o ângulo de espalhamento em geometrias adequadas, pudemos determinar os coeficientes de difusão orientacional correspondentes às três deformações puras de tipo leque (*splay*), torção (*twist*) e flexão (*bend*), possíveis em um cristal líquido nemático. Uma medida anterior das difusividades de leque e torção para a fase nemática de micelas tipo disco ( $N_D$ ) do mesmo sistema [1], resultou em valores diferindo por quase uma ordem de grandeza. Esse efeito foi então interpretado em termos de escoamentos induzidos (*backflow*), que seriam responsáveis por uma redução significativa da viscosidade associada às deformações em leque, graças a uma troca de papéis entre discos e bastões em relação às flutuações tipo leque e flexão, respectivamente. O caso de deformações de flexão assistidas por escoamentos induzidos em nemáticos clássicos (composto por moléculas de tipo bastão rígido) foi reconhecido desde há muito [2]. As novas medidas aqui relatadas possibilitam testar a aplicabilidade do modelo para um sistema nemático cujos objetos elementares são não moléculas, mas micelas, isto é, agregados de moléculas anfífilas, de forma supostamente alongada na fase  $N_C$ . Os resultados aqui apresentados são consistentes com essa visão, e confirmam o efeito de troca de papéis mencionado acima.

[1] M.B. Lacerda Santos, Y. Galeme and G. Durand, *J. Phys., Paris*, 46 (1985) 933.

[2] Orsay Liquid Crystal Group, 1971, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 13 (1971) 187.

## ORIENTATIONAL DYNAMICS AND PHASE TRANSITION IN THE SURFACE LAYER OF A LYOTROPIC LIQUID CRYSTAL

E. A. Oliveira<sup>1</sup>, V.L. Lorman<sup>2</sup>, and B. Metout<sup>3</sup>,

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade de São Paulo, P.O. Box 66318, CEP 05389-970, São Paulo-Brazil, <sup>3</sup>Laboratoire de Physique des Solides, ESPCI-CNRS, 75231 Paris, Cedex 05, France.

**Key-words:** liquid crystals, phase transition, interface

It has been shown that lyotropic liquid crystals exhibit two types of orientation process when an external magnetic field  $H$  is applied, the first one with a response time  $\sim 10s$  related to the orientation of the director in the bulk and a slow one,  $\tau \sim 10^3s$  and proportional to  $1/H^2$ . One of the particular features of lyotropic liquid crystals is the possibility of gliding of the director in the surface layer, that is also an intrinsic property of lyotropics. In the present work we use Landau theory to obtain the dynamical behaviour of the system. The free energy density is written as sum of different contributions coming from the bulk and surface layer. The free energy of the surface layer is represented by two terms, one related to the direct interaction between the interface with  $H$ , and the second is related to the local elastic interaction between the interface and the bulk, with coupling constants  $C$  and  $D$ , respectively. The minimization of the free energy leads to the orientation process with inverse characteristic time proportional to  $H^2$ . Three different equilibrium states are identified, considering the signs of the coupling constants  $C$  and  $D$ . Decreasing the temperature through the sequence of calamitic-biaxial-discotic transition in the bulk induces orientational phase transition in the interface with qualitative changes of dynamic behaviour.

<sup>2</sup>On leave from Université de Picardie, Amiens-France  
Financial support: FAPESP

## TRANSIENTE ESTRUTURAL DE CADEIAS EM FERROFLUIDOS SUBMETIDOS A UM CAMPO MAGNÉTICO

*Pedro Licinio, Ulisses A. Leitão e Luis Claudio M. Belo*  
Departamento de Física - ICEX - UFMG

*Palavras-Chave* : ferrofluidos; espalhamento de luz; DLA

Ferrofluidos são dispersões líquidas de partículas magnéticas sub-domínio estabilizadas. As interações dipolares são responsáveis pela formação de cadeias flexíveis numa ampla faixa de temperaturas e concentrações. A configuração das cadeias, estudada por técnicas de Monte Carlo, mostra um grau de orientação dependente da intensidade de um campo magnético externo. Em particular, nota-se um aumento nas flutuações de densidade transversas ao campo. Acompanhamos o transiente estrutural das cadeias inicialmente desordenadas quando da aplicação de um campo. Utilizamos uma dispersão aquosa de grãos de magnetita de 7,7 nm de raio. Medimos a componente polarizada da intensidade espalhada por um LASER de HeNe em baixos ângulos, num plano perpendicular ao campo magnético. Este espalhamento é proporcional à intensidade das flutuações de densidade com um vetor de onda correspondente à geometria utilizada ( $q = 2.5 \mu\text{m}^{-1}$ ). Observamos que o transiente estrutural, ao contrário do orientacional, é extremamente lento, durando horas. Observamos ainda que a transição passa por um mínimo ao cabo de alguns minutos. Interpretamos estes resultados como devidos a dois processos contíguos. Inicialmente, partículas nas partes das cadeias não paralelas ao campo, sofrem torques individuais. A sua rotação as coloca em interação repulsiva, fragmentando as cadeias. O meio se torna assim mais finamente disperso e homogêneo, espalhando menos luz. A difusão Browniana dos fragmentos é então responsável pelo processo de reestruturação, via agregação das cadeias pelas pontas. Estas idéias são corroboradas pelas seguintes observações: A intensidade do mínimo de espalhamento diminui com o aumento do campo. A reestruturação é mais tardia com campos fracos. A reestruturação segue uma lei de potência, característica dos processos de agregação limitada por difusão (DLA).

(FAPEMIG)

## PHASE TRANSITIONS OF A POLYAMPHOLYTE

*Marcia C. Barbosa and Yan Levin*  
Instituto de Física da UFRGS - RS

*Palavras-Chave:* polyampholytes, collapse

The behavior of a polyampholyte,  $PA$ , chain with  $N$  monomers is analyzed in a framework of the Flory's affine network theory of rubber elasticity. The  $PA$  chain, in addition to the neutral monomers, also contains  $N_+$  positively and  $N_-$  negatively charged monomers. In order to account for the electrostatic interaction, the Debye-Hückel theory augmented by the Bjerrum's ideas of dipolar formation is used. For neutral polymers, where the number of positive and negative charges are equal, we find that at high temperatures the chain exists in a dilute collapsed state with a radius of gyration scaling as  $N^\nu$  with  $\nu = 1/3$  (microelectrolyte). For low temperatures the  $PA$  resembles an affine network (microgel) with  $\nu = 2/5$  (a usual polymer in the extended state scales as  $\nu = 3/5$ ). If the quality of the solvent is decreased, the microgel undergoes a transition to a state with  $\nu = 3/8$  (an uncharged polymer in the coil state scales as  $\nu = 1/2$ ) and if the quality of solvent is decreased even further it collapses into a compact globular state. The high and low temperature regimes are separated by a first-order phase transition. The full phase-diagram of the  $PA$  is calculated as a function of the temperature and of the quality of solvent. The non-neutral  $PA$  is also analyzed in the framework of the Debye-Hückel theory with an extra coulombic interaction between the  $N_+$  -  $N_-$  charges. New phase-diagrams are obtained in this case for different amounts of excess of charges.

(CNPq, FINEP)

## TRANSIÇÃO DE COLAPSO EM ANIMAIS NA REDE

*Roberto N. Onody e Ubiraci P. C. Neves*

Departamento de Física e Informática, IFSC, USP

*Palavras-Chave:* expansão em série, ponto tricrítico, aproximantes diferenciais parciais

Utilizando longas expansões em série para a compressibilidade isotérmica  $K_T$ , obtemos o diagrama de fases e o ponto tricrítico de animais na rede com interação atrativa de primeiros vizinhos. Aplicamos a técnica de aproximantes diferenciais parciais para analisar  $K_T$  como função da fugacidade e do peso de Boltzmann. Para o caso de pontos fixos estáveis, estudamos as curvas características dos aproximantes diferenciais parciais. Nós estimamos para a fugacidade e a temperatura tricríticas os valores  $x_c = 0.024 \pm 0.005$  e  $T_c = 0.54 \pm 0.04$  respectivamente. Esses resultados têm ótima concordância com aqueles obtidos usando a técnica de matriz de transferência. Levando em consideração somente campos de escala lineares, nós determinamos ainda os expoentes de escala  $\gamma = 1.4 \pm 0.2$  e o crossover  $\phi = 0.66 \pm 0.08$ .

(CNPq)

## MACROSCOPIC QUANTUM TUNNELING USING LONG JOSEPHSON JUNCTIONS.

*Orest G. Symko*

Dept. of Physics, University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA

When a Josephson junction is fabricated such that one or two of its dimensions are longer than a Josephson penetration depth, fluxons can be created in the junction and they will lead to a variety of interesting phenomena when the junction is current-biased. The current exerts a Lorentz force on the fluxons causing them to move rapidly within the cavity of the junction. The current-voltage curves reflect fluxon dynamics which are well described by soliton solutions of a perturbed sine-Gordon equation. Penetration of fluxons into such junction has some similarity with fluxon penetration in type II superconductors. The spatial and temporal behaviors of fluxon states in such junctions lead to a variety of applications. One application, of a fundamental nature, is to the study of macroscopic quantum tunneling. The long Josephson junction has all the necessary ingredients for this application. The macroscopic variable is defined as the magnetic flux through the long junction and the fundamental interest is in its tunneling behavior between fluxon states of the junction. Questions which will be addressed deal with conditions for observing macroscopic tunneling in a long Josephson junction, the role of dissipation, the temperature dependence of the tunneling rate, and especially the transition from incoherent to coherent tunneling. In fact, the long Josephson junction biased between two adjacent fluxon states is the macroscopic analog of ammonium molecules whose spectrum was used to provide evidence for the coherent quantum tunneling of nitrogen between a double well on the microscopic scale.

## POLARITONS SUPERFICIAIS EM CILINDROS DIELÉTRICOS ANISOTRÓPICOS

*Eloneid F. Nobre, Raimundo N. Costa Filho, Valder N. Freire, Gil A. Farias*

Departamento de Física - Universidade Federal do Ceará - Ce

*Nilson S. de Almeida*

Departamento de Física Teórica e Experimental- Universidade Federal do Rio Grande do Norte - RN

*Palavras-Chave:* polaritons, anisotropia, cilindros

Neste trabalho estudamos a propagação de polaritons em um cilindro dielétrico. Atenção particular foi dada ao caso da propagação de polaritons superficiais, isto é, àqueles que são localizados junto à superfície do cilindro. No meio externo só nos interessa estudar os modos não-radiativos, aqueles para os quais os campos decaem exponencialmente com a distância ao cilindro. A geometria considerada é um longo cilindro de raio  $a$ , chamado de meio 1, caracterizado por uma função dielétrica  $\epsilon_1(\omega)$ , envolto por um meio infinito, isotrópico, não magnético, chamado de meio 2. A função dielétrica  $\epsilon_1(\omega)$  apresenta anisotropia uniaxial, enquanto que no meio 2 a função dielétrica  $\epsilon_2(\omega)$  é independente da frequência. Nas curvas de dispersão obtidas observou-se uma velocidade de grupo negativa em alguns trechos. Em cada meio determinamos o fluxo de potência, o fluxo de potência integrado, a densidade de energia, a energia por unidade de comprimento e a velocidade de transporte da energia. Mostramos que a velocidade de transporte da energia é igual à velocidade de grupo obtida da relação de dispersão. Para os modos superficiais, o fluxo de potência é negativo no interior do cilindro. O fluxo de energia bem como a densidade de energia apresentam valores máximos no meio externo junto à interface do cilindro. Foram estudados os modos  $n=0$  e  $n=1$ . O modo  $n=0$  mostra ser o único para o qual obtém-se ondas puras TE ou TM. Para grandes valores do raio do cilindro encontramos resultados que se aproximam daqueles obtidos para superfícies planas. Tais resultados foram observados para o óxido de silício ( $\alpha\text{SiO}_2$ ), que é um material com função dielétrica anisotrópica que apresenta várias frequências de ressonância.

## DIFFUSION MONTE CARLO STUDY OF METAL SURFACES IN THE JELLIUM MODEL

*Paulo H. Acioli<sup>1</sup> and D. M. Ceperley*

Departamento de Física, Universidade de Brasília,

Brasília, DF, 70.910-900, Brazil

and

National Center for Supercomputing Applications

Physics Department, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801

*Palavras-Chave:* Quantum Monte Carlo, jellium surfaces, pair correlation functions

We present the results of fixed-node diffusion Monte Carlo calculations of jellium surfaces for metallic densities. We used a trial wave function of the Slater-Jastrow type, with the long range part of the two-body term modified to account for the anisotropy of the system. The one-body term is optimized so that the electronic density from variational and diffusion Monte Carlo calculations agree with each other. The final densities are close to the densities obtained from density functional calculations in the local density approximation and the surface energies to the results obtained using the Langreth-Mehl and Perdew-Wang (91) generalized gradient approximation at high densities  $r_s = 2.07$ . At low densities  $r_s = 3.25$  they agree with the results of the Fermi hypernetted-chain calculations. The work functions computed in this work are in qualitative agreement with the results using the Fermi hypernetted-chain calculations, which are lower than the LDA values. We also present the pair-correlation functions at regions near the surface, showing the anisotropy of the exchange-correlation hole in regions of fast-varying densities. We expect the knowledge of these functions to be useful in the improvement of density functional approximations, as there are exact expressions of the exchange-correlation functionals in which depend on them.

(CAPES, NFS Grant No. DMR-91-17822.)

## LINEAR OPTICAL RESPONSE OF RECONSTRUCTED Sn/Si(111) SURFACES

Humphrey Tah Anyele

Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão - MA.

*Palavras-Chave:* surface state, dielectric function, anisotropy

Powerful techniques for probing structural and electronic properties as well as the chemistry of surfaces involve the use of electron and ion beams; thus forbid their use in high pressure growth chambers. The quest for simple optical techniques which can probe solid surfaces particularly during the growth phase in high pressure chambers has led to the development of techniques like ellipsometry and Reflection Anisotropy Spectroscopy (RAS). It has been demonstrated that changes in the dielectric function resulting from an epilayer as thin as one monolayer on a substrate can be measured using ellipsometry [1]. RAS has been shown to be very useful in the monitoring of growth of semiconductors by MBE and MOVPE [2]. It has been shown that the RAS signal depends on the photon energy and can be used to fingerprint particular surface structures; for example the GaAs (2x4) As-rich reconstructed surface has a particular identifiable camel shaped RAS spectra, whereas the (4x2) Ga-rich surface has an altogether different shape [3]. It is quite clear then, that information relating to the detailed nature of the surface bonds may be extracted from the RAS data by correlating it with detailed calculations of the surface states and corresponding optical response.

A self-consistent tight binding method in the extended Huckel approximation has been used to calculate the electronic band structure and surface dielectric function of three Sn/Si(111) reconstructed surfaces. The calculated anisotropies in the imaginary part of the surface dielectric function and the corresponding reflection spectra as determined from the self-consistent wave functions for the three surfaces are quite different. This suggest that optical probes can be used as tools in the identification of complex surfaces and need not be confined to studying well studied systems like the GaAs surface. The results presented here show that calculations can be used in conjunction with experiments to study other surfaces which are not directly accessible to other techniques.

*References:* [1] U.Rossow, U.Frotscher, W.Richter, H.Wilhel and D.Zahn, Surf. Sci. 287/288, (1993).

[2] W.Richter, Phil. Trans, Royal Society London, A344, 453, (1993).

[3] I.Kamiya, D.E.Aspnes, L.T.Florez and J.P.Haribison, Phys. Rev. B46, 15894, (1992).

## Ressonâncias Eletrostáticas Superficiais em Interfaces com um Número Finito de Ondulações

João Milton Pereira Jr., Gil de Aquino Farias

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará

*Palavras Chave:* plasmons superficiais, topografia de superfícies

São chamados de ressonâncias eletromagnéticas superficiais de forma (electromagnetic surface shape resonances) os modos superficiais localizados na vizinhança de perturbações (elevações, depressões) na superfície de um dielétrico. Apresentaremos os resultados do cálculo numérico das ressonâncias eletrostáticas superficiais de forma, decorrentes da presença de um número finito ( $m$ ) de ondulações na superfície de um meio semi-infinito e na superfície de um filme metálico depositado sobre um substrato dielétrico. Para isso, empregamos o método desenvolvido por Maradudin e Visscher, que permite a obtenção das equações integrais homogêneas que fornecem o campo eletromagnético na vizinhança de um defeito geométrico na superfície de um material com uma função dielétrica isotrópica e real. As ressonâncias superficiais são calculadas para perfis de interface vácuo-dielétrico com diferentes valores da razão altura/largura e do número de ondulações, em um material com uma função dielétrica do tipo elétron livre. Resultados convergentes foram obtidos para até cinco ondulações e evidenciam uma tendência do par de frequências associado ao maior autovalor de se deslocar para as valores das respectivas frequências máximas e mínimas da relação de dispersão de plasmons superficiais em uma grating senoidal em resposta ao aumento do número de ondulações. Foi estudada também a relação entre os valores das frequências e a razão espessura do filme/largura da elevação, assim como o comportamento desses valores face ao aumento da separação entre as mesmas. Os resultados mostram que a influência do número de ondulações sobre o espectro de autovalores depende também da separação entre cada uma, o que evidencia o caráter local dessas ressonâncias.

## SISTEMA DINÂMICO DE CARACTERIZAÇÃO DE FIBRAS DOPADAS COM ÉRPIO

*C. Mazzali e H.L. Fragnito*

Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp - SP

**Palavras-Chave:** fibras dopadas com Érbio, comunicações ópticas, potência de saturação

Apresentamos um método rápido, dinâmico e não destrutivo de caracterização de fibras dopadas com Érbio (FDE), capaz de obter os parâmetros intrínsecos fundamentais para a modelagem das mesmas.

Atualmente os amplificadores ópticos vêm substituindo com sucesso os repetidores eletrônicos nas linhas de comunicações ópticas. O elemento fundamental destes amplificadores é uma fibra óptica dopada com Érbio, cujo espectro de emissão concentra-se na região de mínimas perdas das fibras ópticas de sílica (1.5  $\mu\text{m}$ ). Estes dispositivos definiram esta região espectral como a mais promissora para os novos sistemas, o que gerou conseqüentemente uma demanda de fontes lasers neste comprimento de onda, fontes estas que muitas vezes também utilizam FDE como meios ativos. Com isso, a modelagem teórica e o projeto de diferentes FDE é um tema que mesmo continuando como pesquisa acadêmica, já atinge uma considerável dimensão tecnológica.

Para que a modelagem destes dispositivos possa ser efetuada de maneira eficiente e confiável, é fundamental a determinação experimental dos parâmetros intrínsecos das fibras, sendo que esta determinação deve considerar o comportamento tanto em regime estacionário como dinâmico, já que estes dispositivos podem operar em baixas ou altas taxas de repetição (DC a dezenas de GHz).

A teoria e a montagem experimental aqui apresentados possibilitam, através do estudo da resposta à uma função degrau como excitação, a determinação da potência de saturação intrínseca, do tempo de vida do estado excitado do Érbio, do coeficiente de absorção linear, do comprimento ótimo da fibra para uma dada potência de bombeio, do ganho em regime linear e saturado, e ainda da potência de limiar (threshold) de bombeamento, onde obtemos a condição de transparência da fibra.

(CAPES, CNPq, CPqD Telebrás, FAPESP, FINEP, PADCT)

## DESENVOLVIMENTO DE UM ESPECTRÔMETRO FOTOACÚSTICO

*P.C. Farias\*, N. B. Oliveira, A. Alves\*\*, A. V. B. da Silva\*, A. Ferreira da Siva\*\*\*, I. Pepe\*\**

\* Escola Politécnica - UFBA

\*\* Instituto de Física - UFBA

\*\*\* INPE - LAS

**Palavras Chave :** fotoacústica, espectroscopia, caracterização

A idéia central deste desenvolvimento, é a concepção de um espectrômetro foto-acústico (PA), o mais aberto e flexível possível, de modo a permitir diferentes gamas e métodos de medida. Nossa atual fonte de luz é uma lâmpada de filamento de tungstênio, com 250 W de potência, alimentada por uma fonte de corrente regulada. Esta opção de fonte de luz se baseia nas qualidades de continuidade do espectro e constância da intensidade desse tipo de lâmpada, em comparação com as lâmpadas de descarga em gás (ex. Xenônio). O espectro de normalização, que normalmente utiliza o negro de fumo ou um detector piro-clétrico, foi substituído pelo espectro obtido por uma célula solar pré-calibrada desenvolvida pelo INPE. Ao início e no fim de cada medida, a lâmpada de tungstênio é substituída por uma lâmpada de mercúrio (high pressure Hg lamp) que serve para a calibração do espectrômetro. O espectro de linhas do Hg é varrido e as raíais (406, 436, 546 e 577 nm) são medidas com auxílio de um fototransistor de silício. Este espectro de linhas servirá a determinação das constantes do espectrômetro. O estudo da largura dessas linhas, determina o intervalo de confiança dos resultados de espectroscopia PA dos materiais estudados. Nossa ótica é absolutamente clássica, um feixe de luz paralela é dirigido à rede de difração, que tem seu posicionamento controlado numericamente. Um chopper mecânico, também controlado numericamente, modula a luz aplicada à amostra. A frequência de modulação é regulada e pode ser variada entre 15 e 90 Hz. O detector é um microfone de eletreto comercial, alimentado por uma fonte de tensão regulada ( $dR_{cg} < 0.03\%$ ). O sinal de saída do pré-amplificador é aplicado a um lock-in (Keithley), junto com o sinal de referência, fornecido por um acoplador ótico montado junto ao chopper. A um PC foram adicionadas duas interfaces, a primeira controla o motor de passo e a posição da rede, a segunda faz a conversão dos sinais de intensidade e fase, além da frequência do chopper.

## SISTEMA SENSOR DE CARGAS UTILIZANDO FIBRAS ÓTICAS NO INFRAVERMELHO

*R. Barreto da Silva, R. A. Zângaro, Ricardo E. Medrano e Marcos Tadeu T. Pacheco*

CEPEDEX- Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Extensão

UNIVAP - Universidade do Vale do Paraíba.

tel.(0123) 22-2355 r.243 - São José dos Campos - SP

E-mail : lope@univap.br

*Palavras-chave: sensores, fibra ótica, ensaios estruturais*

Este trabalho apresenta a caracterização do comportamento de uma fibra ótica monomodo de média birrefringência ( $\lambda_0 = 1.24 \mu\text{m}$ ), acoplada diretamente a um laser semiconductor polarizado ( $\lambda = 1.3 \mu\text{m}$ ), inserida em um corpo de prova de resina epoxi com dimensões de 100x50x3 mm. Para otimização da transferência de carga à fibra ótica, esta é inserida no corpo de prova sem o acrilato. A resina epoxi é composta por Araldite CY-248 e endurecedor HY-956. O conjunto é submetido a uma força radial, através de uma máquina de ensaios de compressão, a birrefringência induzida na fibra pelo efeito fotoelástico modifica o estado de polarização da luz guiada. As mudanças no estado de polarização da luz são então convertidas em variação de intensidade após passar por um analisador. O sinal detectado por um fotodiodo de germânio, é armazenado e tratado em um PC 486. Os resultados obtidos indicam que a carga necessária para se obter uma variação de  $\pi/2$  na fase do campo magnético é de 128 kgf, estando dentro do previsto pelo modelamento do sistema que é de 134 kgf. A inserção da fibra sem acrilato no interior do corpo de prova permite a otimização da transferência da carga aplicada à fibra ótica; pode-se verificar também maior estabilidade do sinal devido a compactação do sistema.

(UNIVAP)

## INTERFERÔMETRO COM CONTROLE ELETRO-ÓPTICO: APLICAÇÕES EM MEDIDAS DE AMPLITUDE E FASE DE SINAIS ÓPTICOS E NA CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS ELETRO-ÓPTICOS

*Kitano, C., Monteiro, E. C., Pacheco, G. M., Oliveira, J. E. B.*

ITA - Instituto Tecnológico de Aeronáutica - CTA - SJC- SP

*Palavras-Chave: interferometria, demodulação óptica, efeito eletro-óptico*

A crescente utilização de laser em instrumentação e telecomunicações tem demandado o desenvolvimento de técnicas de processamento de sinais ópticos que possibilitem as medidas simultâneas de amplitude e fase desses sinais. Estas medidas são notadamente relevantes na caracterização de propriedades eletro-ópticas lineares e não-lineares de polímeros e cristais, tais como o niobato de lítio. Uma das técnicas que apresenta grande potencialidade prática é a que consiste na utilização de interferometria óptica homodina com controle através do efeito eletro-óptico. Neste tipo de técnica, um dos braços de um interferômetro de Michelson ou Mach-Zehnder contém um modulador de fase óptica de natureza eletro-óptica. Quando o sinal elétrico modulador é do tipo dente-de-serra linear, com características apropriadas de amplitude e frequência, o interferômetro óptico permite que sejam medidas a amplitude e a fase do sinal óptico de forma independentes, utilizando-se a técnica de supressão da banda lateral imagem do espectro da intensidade óptica na saída desse interferômetro. Neste trabalho apresenta-se uma análise do interferômetro homodino com controle eletro-óptico para demodulação óptica, e demonstra-se como a amplitude e fase do sinal óptico podem ser determinadas de forma independentes. Os resultados da análise foram utilizados para projetar e montar um interferômetro de Michelson no qual o modulador eletro-óptico é constituído de  $\text{LiNbO}_3$ . Os dados experimentais obtidos com o dispositivo implementado apresentaram excelente concordância com as previsões teóricas. Para efeito de calibração do dispositivo utilizou-se, como teste, uma célula Pockels com características conhecidas, e obteve-se discrepâncias inferiores a 2%. Os resultados experimentais também permitiram a caracterização eletro-óptica dos cristais de  $\text{LiNbO}_3$  crescidos pelo IFSC (USP).

## CONECTORIZAÇÃO DE RIBBONS MULTICANAL DE FIBRAS MONOMODO

*F. Rudge Barbosa, Hélio Godoy, Antonio Coral*

CPqD - Telebras - Campinas SP

*Roberto Rosário*

Fotonica Tecnologia - Campinas SP

Palavras chave: Ótica, Fibras Óticas, Conectores

A tecnologia ótica está cada vez mais presente não só em telecomunicações de longa e média distâncias, como também na distribuição de sinais de banda larga, e mesmo em interconexões inter- e intra-equipamento. Para essas interconexões são necessários sistemas altamente paralelos. Esses sistemas, operando em altas taxas, requerem canais paralelos de fibras (ribbons) e conectores apropriados a esses ribbons. Num trabalho anterior [1], desenvolvemos a configuração de fibras multimodo, que tem "ampla" tolerância de posicionamento. Neste trabalho apresentamos o desenvolvimento das interconexões conectorizadas com fibras monomodo, que requerem maior precisão e permitem maiores produtos distância x banda passante, resultando em elevado desempenho.

São apresentados os processos de conectorização dos ribbons, as jigas de polimento e seus aperfeiçoamentos. Abordamos também o desenvolvimento em nosso laboratório de uma referência fixa laser dada por um conjunto monolítico de 8 lasers (array 8-canais), com encapsulamento metálico hermético acoplado a um ribbon monomodo comercial. A finalização e os testes de conexão dos ribbons conectorizados, medindo-se as perdas de emendas de diferentes amostras, em variadas combinações.

## Sensor a Fibra Ótica para Hipertermia por Microondas

*Hypolito José Kalinowski e Luiz Augusto Polydoro*

*Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, 80230-901 Curitiba, PR*

*e-mail: hjkalin@cpgei.cefetpr.br*

*Palavras Chave: Termometria/Sensores a Fibra Ótica/Hipertermia*

Um termômetro a fibra ótica para aplicações em tratamento por hipertermia com aplicação de microondas foi desenvolvido utilizando-se uma ponta sensora formada por uma fibra curva, recoberta por um polímero [1]. Um LED, com comprimento de onda operacional de  $1.3\mu\text{m}$  é utilizado como fonte de luz, modulada em intensidade. O uso de um acoplador ótico (97:3) permite a monitoração da potência ótica do LED e serve para normalizar o sinal do sensor. Conectores mecânicos são utilizados para conectar as fibras dos diversos componentes. A potência transmitida pelo sensor, cuja intensidade depende da temperatura, é amplificada por circuito "lock-in" e lida por um microprocessador, sendo normalizada e comparada com uma tabela de calibração instrumento, previamente armazenada. O sistema apresenta sensibilidade de  $0.1^\circ\text{C}$  e precisão de  $0.2^\circ\text{C}$  na faixa de interesse,  $20^\circ\text{C}$  a  $60^\circ\text{C}$ . A ponta sensora tem diâmetro de  $1.5\text{mm}$  e é totalmente dielétrica, apresentando ainda uma resposta bastante rápida devido à baixa capacidade térmica.

Testes de envelhecimento acelerado quando submetido a exposições de microondas em um forno doméstico (Potência de  $700\text{W}$ ) não evidenciaram nenhuma mudança nas características operacionais da ponta sensora. Tais testes foram realizados para exposições de até duas horas, com registro das curvas de calibração a cada  $30\text{min}$  de exposição.

[1] - I. I. Silveira Jr., L. C. Guedes Valente e H. J. Kalinowski, Rev. Bras. Microeletron. 1(2), 1-8 (1993).

## ESTUDIO POR SIMULACION DIGITAL DEL POTENCIAL ELÉCTRICO DE UN MODELO DINÁMICO DE CARGAS PUNTALES: APLICACIÓN A UNA MACROMOLÉCULA

*Diego F. Vallejo (\*), J.R. Grigera (\*\*)*

(\*) Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, C.C. 565, 1900 La Plata, Argentina

(\*\*) Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos Departamento de Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Exactas Universidad Nacional de La Plata.

*Palabras Claves:* Simulación, Dinámica Browniana, Apantallamiento de Debye.

Resultados teóricos, experimentales y computacionales obtenidos en nuestro laboratorio ponen en evidencia la importancia de la dinámica de las cargas eléctricas en la interacción en soluciones electrolíticas. Dichas interacciones son relevantes para la actividad enzimática de, entre otras, la Superóxido Dismutasa (SOD), macromolécula que cataliza la dismutación del  $O_2^-$  (subproducto venenoso de la respiración celular). La alta eficiencia con que actúa la SOD sobre el sustrato (de carga negativa) contrasta fuertemente con la repulsión electrostática inicial que debería ocurrir dado que su carga es igual a  $-4$  a pH fisiológico. Para investigar el efecto dinámico de los iones que rodean la SOD en el medio natural, se realizaron simulaciones de la misma modelándola como un conjunto de cargas puntuales sumergidas en una nube de iones  $Cl^-$  y  $Na^+$  (también puntuales). Se estudiaron los potenciales eléctricos generados por dicho modelo de proteína en solución considerando fluctuaciones de carga de los grupos que poseen alta movilidad (según trabajos previos de simulación). Los resultados muestran mapas de potencial en los que se ven regiones de potencial eléctrico positivo ampliadas en los casos de carga fluctuante. Esto pone en primer plano la dinámica del problema como un factor importante en el reconocimiento inicial enzima-sustrato. Se concluye que la diferente movilidad de determinados grupos de la SOD con respecto a otros residuos de la misma, resultan en un apantallamiento selectivo en frecuencia, por parte de la nube iónica, que redundan en una interacción efectiva atractiva sobre el sustrato  $O_2^-$ .

## SIMULAÇÃO DE MEMBRANA MODELO DE ANFIFÍLICOS DE DUPLA CAUDA EM REDE UTILIZANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO

*Cláudio Saburo Shida & Vera Bohomoletz Henriques*

Dpto de Física Geral, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Paulo Mascarello Bisch*

Instituto de Biofísica, Universidade Federal do Rio de Janeiro

*Palavras-Chave:* Monte Carlo, membrana, anfílico.

Membranas são, em geral, organizações moleculares constituída por moléculas anfílicas de dupla cauda, também conhecidas como fosfolipídios. As membranas definem uma separação seletivamente permeável entre dois meios e isso faz com que sejam essenciais para a existência da vida. O algoritmo de simulação desenvolvido baseia-se no conhecido método de Monte Carlo e utiliza a probabilidade de Metropolis. A simulação é realizada num modelo de rede, em duas dimensões, para uma solução de moléculas anfílicas de dupla cauda em "água". O anfílico estilizado é definido como um conjunto de  $N$  sítios da rede que estão permanentemente ligados de um modo bem definido ( $N=7$ , neste trabalho), que apresenta as mesmas características qualitativas de um anfílico de dupla cauda real, ou seja, a molécula tem a região da cabeça polar hidrofílica (tem afinidade pela "água") e uma região hidrofóbica (não tem afinidade pela "água") constituídas pelas duas caudas. A hidrofílicidade e a hidrofobicidade são representadas por variáveis tipo Ising. Os anfílicos são movimentados na rede respeitando a dinâmica de Kawasaki (concentração constante). O objetivo do trabalho é estudar a formação de estruturas lamelares (membranas) e suas propriedades no equilíbrio térmico. Entre as propriedades estudadas estão o calor específico, a agregação, energia interna, a função de correlação das cabeças polares, etc. Resultados da simulação mostram que, diferentemente de um sistema micelar (real ou simulado), o sistema com anfílicos de dupla cauda não apresenta o conhecido número médio de agregação, ou seja, nas redes até agora simuladas,  $L=20$  com 10 e 20 anfílicos e caudas pequenas ( $N=7$ ), o que se observa é a formação de um único agregado alongado parecido, em média, com uma membrana; e também uma concentração de anfílicos livres muito pequena a temperaturas abaixo da transição de fase agregado/desagregado. Os dados obtidos até aqui concordam, qualitativamente, com os resultados observados em estudos experimentais de membranas modelo.

(FAPESP)

## ESTUDO DE UM MODELO PARA A ESTRUTURA ESPACIAL DE PROTEÍNAS

Alexandre Tavares Baraviera<sup>1</sup> e Maria Elisa Sarraf Borelli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Matemática Pura e Aplicada - RJ

<sup>2</sup>Depto. de Física Geral - Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* proteínas, estrutura espacial, minimização

A grande dificuldade em prever-se a estrutura espacial de uma proteína a partir da sequência de aminoácidos que a constitui é uma das maiores limitações da biotecnologia, e a previsão é em si mesma um problema rico e interessante. Para ter um vislumbre de como opera este fenômeno faz-se necessária a utilização de modelos nos quais as complexas interações originais são substituídas por outras mais simples, mantendo no entanto as principais características físicas do problema. Aponta neste sentido o trabalho de Stillinger et al (*Phys. Rev. E* 48 1469-1477 (1993)), no qual é considerada uma cadeia bidimensional de aminoácidos  $a_1, \dots, a_n$ , onde os  $a_i$  podem ser de apenas dois tipos: A ou B. A ligação entre  $a_i$  e  $a_{i+1}$  é de comprimento unitário, sendo livre para girar no plano, o que pode ser descrito pela introdução de coordenadas  $\theta_i$  definidas pelos ângulos entre as ligações  $a_{i+1} - a_i$  e  $a_i - a_{i-1}$ . A configuração  $\theta_i = 0$  corresponde à cadeia linear. A interação entre os aminoácidos é descrita pelo potencial

$$\Phi = \sum_{i=2}^{n-1} V_1(\theta_i) + \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=i+2}^n V_2(r_{ij}, a_i, a_j)$$

onde  $V_1(\theta) = 1/4 (1 - \cos\theta)$ ,  $V_2$  é um potencial de Lennard-Jones dado por  $V_2 = 4[r_{ij}^{-12} - C(a_i, a_j)r_{ij}^{-6}]$ , com  $C(A, A) = +1$ ,  $C(A, B) = C(B, A) = -1/2$  e  $C(B, B) = +1/2$ , e  $r_{ij}$  é a distância entre  $a_i$  e  $a_j$ . Destas expressões fica claro que  $V_1$  favorece um alinhamento da estrutura, enquanto que a parte atrativa de  $V_2$  provoca um enovelamento da mesma. A parte repulsiva de  $V_2$  combinada com  $V_1$  resulta no chamado efeito de exclusão de volume. Do ponto de vista matemático, determinar a estrutura espacial da cadeia equivale a encontrar uma configuração  $\{\theta_i\}$  que minimiza o potencial  $\Phi$ . Entretanto, não existe um algoritmo eficiente para a determinação de mínimos globais de funções quaisquer de várias variáveis. Neste trabalho estudamos este modelo e a sua extensão em dimensão 3 utilizando um algoritmo de minimização em duas etapas. Na primeira são geradas configurações  $\{\theta_i\}$  ao acaso, selecionando-se entre estas a de menor energia. Esta é então utilizada como semente para a segunda etapa, na qual um processo iterativo converge para uma configuração correspondente a um mínimo local. Desta maneira podemos encontrar as estruturas estáveis para pequenas perturbações da energia.

## PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO TRIPTOFANO E DO ÁCIDO AMINOBENZÓICO

ANDRÉ TSUTOMU OTA<sup>1</sup>

MICHEL LOOS<sup>2</sup>

AMANDO SIUITI ITO<sup>2</sup>

1. Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, Londrina-PR

2. Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

*Palavras-Chave:* estrutura eletrônica, semi-empírico, interação de configurações

Realizamos cálculos semi-empíricos no ácido aminobenzóico (Abz) e seus compostos com a fenil-alanina, a glycina e a prolina ligadas ao terminal carboxila do Abz. Fizemos também estes mesmos cálculos para o triptofano (Trp) e seus análogos 7azaTrp, no qual um átomo de nitrogênio ocupa a posição 7 do anel aromático e o 5-OHTrp, no qual um grupo OH é ligado à posição 5 do anel aromático. O interesse nestes grupos prende-se às suas propriedades fluorescentes quando irradiadas com radiação UV-visível. Os resultados foram correlacionados com dados experimentais obtidos de medidas de absorção óptica dos compostos em meio aquosos. Utilizamos para os cálculos acima o pacote GEOMOP (Desenvolvido em Nancy-Fr. e no grupo de biofísica do IFUSP por M. Loos). Os resultados dos cálculos da interação de configurações coincidem com os dados experimentais. Assim, para os compostos do Abz com a glycina e a phenilalanina, o pico de absorção se dá em torno de 310 nm e obtivemos 306 e 309 nm, respectivamente; para o Abzprolina, tem-se experimentalmente absorção em torno de 290 nm e obtivemos 294 nm. Para o Trp, os análogos 7aza e 5-OH apresentam um deslocamento para o vermelho, o que também acontece em nossos cálculos, com valores de 292 nm para o Trp, 293 nm para o 7azaTrp e 303 nm para o 5-OHTrp. Estes resultados indicam que estudos mais sistemáticos destas moléculas podem ser realizados, tendo-se como ponto de partida os cálculos acima.

(PICD-CAPES, CNPq)

## MODELO BIOFÍSICO DE TRANSPORTADOR DE CARGA BASEADO NO RECONHECIMENTO DE FLUTUAÇÕES

Niels Fontes Lima - CEFET-Ba/UFUSP

Palavras-chave: Transporte ativo, flutuações microscópicas.

Em trabalhos apresentados em edições anteriores deste Encontro definimos e discutimos um circuito RC browniano, baseado no Modelo do Acesso Alternado<sup>(1)</sup>, que através de uma chave interruptora pode ser conectado ora a um, ora a outro reservatório de carga elétrica. O estado da chave interruptora é controlado pela posição de um sensor de carga, o qual interage com a carga no capacitor e aciona a chave em conformidade com esta. A carga no capacitor e o movimento do sensor são modelados por equações de Langevin acopladas. O modelo é estudado simulando-se numericamente a evolução temporal de réplicas do sistema, sujeitas a diferentes realizações do processo estocástico. Se operado de forma conveniente, o modelo pode funcionar como uma "bomba" elétrica peculiar, que usa informação sobre a carga flutuante para obtenção de fluxo ativo, de acordo com uma proposta original de Procópio e Fornés<sup>(2,3)</sup>. O "demônio de Maxwell" é facilmente exorcizado pelo esquema proposto por Bennet<sup>(4)</sup> e Landauer<sup>(5)</sup>, o qual exige o acoplamento do sistema a uma fonte externa de neguentropia que fornece a força termodinâmica necessária para a reinicialização do sensor e o consequente descarte de informação (o "resetting" de Bennet & Landauer).

No presente trabalho apresentamos e discutimos os resultados obtidos pela simulação numérica das equações acopladas de Langevin quando o sensor é submetido a um processo de reinicialização induzido externamente, o qual pode ser modelado como uma reação química fora do equilíbrio (acoplada à reação de transporte através do funcionamento do sensor/interruptor). Os resultados obtidos mostram que o sistema funciona como uma máquina que converte energia de uma forma (a utilizada na reinicialização) em outra (trabalho sobre os reservatórios), com a particularidade de que ele pode, a depender dos parâmetros que caracterizam o modelo, apresentar uma dissipação negativa, ou seja converter calor em trabalho. Quando incluímos a produção de entropia da reação que induz o "resetting" verifica-se que o processo não viola a segunda Lei da Termodinâmica.

REF: (1) Lauger, P. - *Physiol. Rev.* 67, 1296 (1987); (2) Procópio, J. e Fornés, J.A. - *J. of Colloidal and Interface Sciences*, 134 (1), 279 (1990); (3) Procópio, J. e Fornés, J.A. - *Phys. Rev E*, 51 (1), 829, (1995); (4) Bennet, C. - *Sci. Am.* 257, 108 (may 1987); (5) Landauer, R. - *Sci. Am.* 253, 48 (jul 1985)

## DINÂMICA NÃO LINEAR DE FILMES LIPÍDICOS SUJEITOS A FORÇAS ELÉTRICAS: RESULTADOS NUMERICOS.

C. Anteneodo<sup>1,2</sup>, E. Ramos de Souza<sup>1,3</sup> e P. M. Bisch<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Biofísica, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ; <sup>2</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ; <sup>3</sup> Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia, Salvador, BA

Palavras-Chave: bicamada de lipídios, ruptura, potencial elétrico

A bicamada lipídica constitui a estrutura básica das membranas biológicas. Baixo condições fisiológicas normais, esta estrutura atinge um estado de equilíbrio estável, porém, em algumas situações de não equilíbrio, a estrutura pode romper. Muitos fenômenos celulares (e.g., endocitose, exocitose e divisão celular) estão associados ao movimento, deformação e ruptura das biomembranas. No presente trabalho, estudamos a dinâmica e ruptura de filmes perturbados no modo simétrico "squeezing". A evolução do filme pode ser descrita por uma equação altamente não linear [1] derivada da equação de Navier-Stokes, tratando-se o filme e as fases externas como fluidos viscosos newtonianos. Este tratamento leva em conta que os componentes do filme estão sujeitos a forças de van der Waals, estéricas e elétricas. As últimas decorrem da presença de cargas tanto na superfície do filme quanto no meio externo. A presença de campos elétricos externos também é levada em conta. Uma única equação expressa em termos da espessura do filme é obtida no caso de um filme com superfícies tangencialmente imóveis. Resolvemos numericamente a equação não linear que descreve a dinâmica do filme como um problema de valores iniciais com condições de contorno periódicas. A estratégia numérica consiste em resolver a representação em diferenças finitas da equação de evolução. Comparamos os tempos de ruptura assim obtidos com estimativas analíticas lineares e não lineares. As forças elétricas, basicamente, destabilizam o filme perturbado acelerando a ruptura, como preveem qualitativamente os resultados analíticos. Por outro lado, forças estéricas suficientemente grandes impedem que o filme se estreite além de uma espessura mínima levando o filme a um estado estacionário diferente do planar. Este resultado numérico, consistente com a análise não linear, não é previsto pela aproximação linear, indicando que a evolução do filme pode depender fortemente das não linearidades do problema.

[1] E. Ramos de Souza, N.M. Costa Pinto & P. M. Bisch, submetido a *J. of Coll. & Int. Sci.*

(CNPQ)

## ELECTRONIC STRUCTURE OF CATECHOL MELANINS

*\*David Pacheco-Salazar, Luz Elena Bolívar-Marínez, \*Marília J. Caldas  
and Douglas S. Galvão,*

Instituto de Física Gleb Wataghin- Universidade Estadual de Campinas,

\* Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*key words* : Catechol, Semi-empirical methods, biopolymer.

Melanins are biological pigments widely spread in nature, from fungi to man. They are roughly classified in to three large groups: eumelanins (black or dark-brown nitrogen containing pigments), pheomelanins (the pigment giving color to, e.g., red hair and which also contains sulfur), and allomelanins (occurring in plants).

Eumelanins have been object of intense experimental and theoretical studies in the last years, but comparatively very few studies have been carried out for allomelanins.

Allomelanins are in general black and are found in fungi, seeds of many flowering etc. It is believed that those pigments are direct involved in the darkening of leaves and fruits. They are formed by enzymatic oxidation of diphenols and are also known as "catechol melanin". There are experimental evidences that the orthobenzoquinone molecule participates actively in the process of catechol melanin polymerization.

In this work we have investigated the electronic structure of catechol units (up to the trimer level) we have analyzed all possible polymerizationpaths based on the orthobenzoquinone unit. The geometrical aspects were investigated using the well-known MOPAC methods (Mndo, Aml, and Pm3). The obtained geometries were used as input to the spectroscopic calculations using the ZINDO/S-CI method.

Our results indicate that in terms of-energetic cost of polymerization. There is not a well-defined direction, suggesting that amorphous structure are likely probable to form. Our results also show that these compounds are electron acceptors(similarly to eumelanins), in this sense they could work as potentially cytotoxic deactivations. The spectroscopic results strongly support the semiconductor models proposed for melanins.

(CNPq, CAPES, FAEP, FINEP, and FAPESP)

## ERYTHROCYTE MEMBRANE POTENTIAL PROFILE: EFFECT OF IONIC STRENGTH

*Frederico Alan de Oliveira Cruz, Mileni Britto de Oliveira e Célia Cortez Maghelly*  
Departamento de Ciências Fisiológicas, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

*Key words*: Electric potential profile, ionic strength, erythrocyte membrane

Mathematical methods of hydrodynamic stability analysis can be applied in the study of deformation phenomena as the system response to a small perturbation of the initial configuration of the membrane. For this purpose the initial state of the system must be well specified. The knowledge of the potential profile across the membrane is important, as well as the knowledge of the influence of certain parameters, such as ionic strength, on this profile. Potential electric profile across membrane for several values of ionic strength were obtained by application of data from experimental measures of electrophoretic mobility at different ionic strengths. The membrane potential in function z-coordinate was calculated for a complex model which considered the distribution of fixed charges in the vicinity of the membrane, the space charges for the glycocalix and spectrin layer. The glycocalix is an outer layer rich in polysaccharides which are associated with the molecules of the lipidic bilayer and the spectrin layer is a inner protein trap that supports the membrane. The present model uses the surface charge for the head groups of the phospholipids and space charges for the spectrin layer and to the glycocalix. The charge densities of glycocalix and the spectrin along z was considered to be almost constant in the z direction. The origin of the Cartesian coordinate axis was located at the bilayer center. The potential equation for this model was obtained by integration of nonlinear Poisson-Boltzmann. Our results suggest that a small variation in ionic strength can lead to significant changes in both the surface electric characteristic. It is shown that the intracellular potential profile is strongly influenced and the inner surface potential becomes more negative with ionic strength increase.

(FAPERJ)

## CRITICALIDADE AUTO-ORGANIZADA, EMBRIOGÊNESE E EUTELIA

*João da Costa Chaves Júnior<sup>1</sup> e Amando Siuiti Ito<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Ciências Biológicas da Faculdade de Ciências e Letras de Assis - UNESP

<sup>2</sup> Departamento de Física Geral e Experimental da Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* criticalidade auto-organizada, eutelia, Caenorhabditis elegans

A embriogênese e a diferenciação celular são fenômenos que ocorrem em escala ontogenética, e culminam com a produção de um indivíduo adulto contendo uma população de células que flutua em torno de um valor característico da espécie, distribuídas em um certo número de tipos diferentes, também característico da espécie. No entanto, ao atingir a fase adulta, quando cessa o crescimento, continua havendo a produção de células novas dentro do sistema, estabelecendo-se um mecanismo compensatório com a "saída" de células, ou por que morrem, ou porque são retiradas através dos mecanismos fisiológicos do sistema imune. Mostramos neste trabalho que é plausível que este fenômeno seja concebido como um processo de transporte num sistema aberto, que se torna estável do ponto de vista populacional quando atinge um estado crítico auto-organizado. Foram feitas simulações com modelo de criticalidade auto-organizada numa rede plana quadrada com  $L^2$  sítios, associando-se a cada sítio igual probabilidade, e variando-se os parâmetros da dinâmica, mostrando que ela é compatível com a embriogênese do Caenorhabditis elegans. Sugerimos que a lei  $P_c(L) = C.L^{3,4}$ , válida para o C. elegans, seja válida para outros sistemas vivos, filogeneticamente próximos que exibem eutelia.

## ALGUNS MODELOS DINÂMICOS PARA A RESPOSTA IMUNOLÓGICA

*Antônio Carlos da Silva Filho e Fátima Maria Helena Simões Pereira da Silva*

Fac. de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto e Fac. de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo.

*Palavras-Chave:* resposta imunológica, dinâmica imunológica, imunologia teórica

Sistemas imunológicos vêm sendo estudados já há algum tempo sob o ponto de vista de sistemas dinâmicos. Uma possível abordagem para alguns problemas deste campo reside em considerar a dinâmica para as diferentes populações de substâncias, células e microorganismos envolvidos. O modelo de Mayer, Zaenker e Heiden (MZH) é um exemplo desta abordagem. Este modelo considera a interação de um sistema imunológico com um população de invasores, como bactérias, vírus, antígenos ou células tumorais, interação esta descrita por um sistema de duas equações diferenciais ordinárias. O presente trabalho consiste em explorar vários sistemas de duas equações diferenciais ordinárias, os quais são modificações do sistema MZH. Várias modificações foram feitas e uma ampla gama de resultados obtidos por simulação. Todos os sistemas possuem onze ou doze parâmetros ajustáveis e, neste estudo, verificamos o comportamento das soluções dos sistemas para várias regiões deste parâmetros. Os resultados obtidos são consistentes com os conhecimentos do sistema imunológico e praticamente todas as possibilidades de interação entre "defensores" e "invasores" foram observadas. Assim, obtivemos regiões de parâmetros com atratores (onde, quase sempre, o número de "invasores" fica muito pequeno), outras com ciclos-limites, onde os números para ambas as populações oscilam numa certa região, outras onde o número de "invasores" cai a zero após um certo tempo (o que significa que a "invasão" foi controlada) e outras onde este número tende a infinito (o que significa que os defensores foram derrotados). Obtivemos, também, resultados que mostram, num diagrama de fases, a existência de limiares para a quantidade de "defensores", a partir dos quais a "invasão" pode ser ou não controlada, indicando que, sob determinadas circunstâncias, uma "invasão" que destruiria um organismo pode ser controlada com um pequeno aumento artificial do número de "defensores" e que, nestes casos, segundas "invasões" podem ser controladas pelo número residual de "defensores" sobreviventes.

## SIMULAÇÕES DE DINÂMICA DE MACROMOLÉCULAS EM ÁGUA

*Marta M. Cassiano*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Paulo M. Bisch*

Instituto de Biofísica, Universidade Federal do Rio de Janeiro

**Palavras-chave:** dinâmica molecular, interação com o solvente, métodos computacionais

Simulações de dinâmica molecular são amplamente utilizadas no estudo de mudanças conformacionais de macromoléculas ocorridas devido às interações com o meio em que se encontram.

O programa THOR de mecânica e dinâmica molecular está sendo modificado, de modo que a dinâmica de macromoléculas na presença explícita de moléculas do solvente possa ser simulada. As alterações no algoritmo englobam tanto aquelas decorrentes da introdução do solvente no sistema, como aquelas visando uma diminuição no tempo de processamento, uma vez que, agora, o número de átomos envolvidos na simulação é muito grande.

O sistema inicial é constituído por uma caixa cúbica contendo a macromolécula em seu centro e moléculas de água uniformemente distribuídas. São usadas condições de contorno periódicas, simulando um meio infinito, e é definido um raio de corte, que delimita a distância de interação. Para aumentar a eficiência do programa foi introduzido o método da lista de vizinhos.

Encontra-se em andamento uma simulação de dinâmica do hormônio peptídico  $\alpha$ -msh em água. Espera-se alcançar um tempo total de integração de 200 picosegundos.

(CNPq)

## ANÁLISE QUANTITATIVA DA QUALIDADE DE IMAGENS DIGITAIS COM O USO DO ESPECTRO DE WIENER

*Yeda Regina Venturini*

UFSCAR - DC

*Paulo Estevão Cruvinel*

EMBRAPA - São Carlos

**Palavras-Chave:** qualidade, ruído, imagem

Neste trabalho foi desenvolvido um algoritmo para análise de qualidade de imagens digitais com o uso do espectro de Wiener. Esta técnica de análise espectral de Wiener selecionada permite obter informações sobre a quantidade, bem como sobre as características do ruído contido na imagem. Desta forma, utilizando a base teórica de transformada de Fourier e de processos aleatórios, foi desenvolvido um algoritmo para análise espectral de Wiener. Com o objetivo de avaliar o método foram observados os resultados da aplicação do algoritmo desenvolvido em imagens decorrentes de tomografias. Foram utilizadas imagens de um phantom de nylon obtidas com o minitomógrafo da EMBRAPA-CNPDIA e reconstruídas utilizando o método de reconstrução por retroprojeção filtrada discreta. Esse phantom foi ensaiado tomograficamente levando-se em consideração diferentes parâmetros, como abertura de amostragem, intervalo de amostragem e tempo de exposição. Foi observado que a quantidade de ruído contida na imagem gerada é alterada com a variação dos parâmetros utilizados na aquisição da mesma, conforme esperado. Adicionalmente, o método permitiu verificar as características deste ruído e como o mesmo é influenciado pela variação nos parâmetros utilizados na aquisição da imagem. Através desta análise é possível selecionar parâmetros e realizar ajustes no sistema de forma a minimizar as distorções causadas.

Os resultados obtidos com a implementação do algoritmo indicam sua potencialidade para análise de qualidade de imagens obtidas não somente com tomógrafos de raio X ou Gama, como também para análise de imagens obtidas com outros sistema que envolvam a aquisição e a reconstrução de imagens digitais.

## A GEOMETRICAL AND SPECTROSCOPICAL STUDY ON THE MOLECULES RELATED TO EUMELANINS

*Luz Elena Bolívar-Marínez, Douglas S. Galvão, Marília J. Caldas\**

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas,

Instituto de Física - Universidade de São Paulo\*

*key words* : Eumelanins, semi-empirical method

We have carried out Pm3 (Parametric Method 3) and Zindo (Zerner's Intermediate Neglect of Diatomic Overlap) calculations on the neutral and charged 5,6-Indolequinone molecules and its reduced forms (semiquinone and hydroquinone). These molecules are believed to compose the major part of the active material of eumelanin, a biological pigment present in mammals (in illuminated and non-illuminated parts of living organisms).

From the biological point of view it is accepted that the main protection of the skin against the biochemical devastation induced by exposure to U.V. radiation derives from the presence of melanins in the epithelial tissue.

There are experimental evidences relating (genetic or acquired conditions) eumelanins to other biological processes such as, aging, vitiligo, albinism and parkinson's disease.

Our results demonstrate that monomers and dimers can behave as electron acceptors and their optical absorption threshold strongly support the semiconductor model proposed for melanins. These physical mechanisms could be the basis for other biological functions for eumelanins (cellular protection against free radicals produced or not by radiation or metabolic processes).

The difference in energy among the many possible path polymerizations suggest that amorphous structures are very probable. These amorphous structures could produce another heat dissipation through an efficient electron-phonon mechanism.

(CNPq, CAPES, FAEP, FINEP, and FAPESP)

## INTERACTION OF CHLORPROMAZINE WITH IRON-PORPHIRINS

*Célia Cortez Maghelly\*, Fernanda R. Burgel, Kátia C. Garcia e Sônia R. W. Louro*  
Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - RJ  
Departamento de Ciências Fisiológicas, UERJ\*

*Key-words*: chlorpromazine, porphyrins, spectrophotometry

Chlorpromazine (CPZ) is a phenothiazine drug largely employed in psychiatric treatments. It has been suggested (J. Neurochem. 1991, 62:1112-1118) that the long-term treatment with this drug induces iron sedimentation in brain blood vessels as a toxic effect. Due to its amphipathic characteristic, CPZ molecules strongly interact with membrane lipid and hydrophobic portions of proteins. Interactions of CPZ with iron porphyrins hemin and heme-NO are investigated in this work, under motivation that these interactions can be related to the toxic effect due to iron sedimentation in membranes. Hemin solutions are titrated by increasing concentrations of CPZ ( $\sim 10^{-5}$  M). Optical spectra were obtained using a diode array spectrophotometer HP-UV 8452A. The major changes in hemin spectrum due to CPZ interaction occur in 300-400 nm. Variations of the absorbance at 352 nm are used to calculate CPZ/hemin binding constant  $K_b$ . The value  $K_b = 6.2 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$  is obtained. The Soret band of heme-NO presents a single peak at 378 nm, with a molar absorption coefficient of  $4.2 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ . Addition of CPZ causes a decrease and a red shift of this peak. Absorption changes show that the interaction of CPZ with heme-NO is more complex than that with hemin, but the binding constant is about the same order of magnitude. The affinities of both CPZ and hemin for membrane lipids are one order of magnitude lower than that found for CPZ to hemin. This indicates that it is worth investigating the interactions of the complex CPZ/hemin with membrane lipids.

(MCT-CNPq)

## FLUCTUATIONS OF THE PROTON ELECTROMOTIVE FORCE ACROSS INNER MITOCHONDRIAL MEMBRANE

Joaquim Procopio

*Instituto de Ciências Biomédicas, USP, Caixa Postal 66208, 05508-970, São Paulo, SP, Brazil.*

José A. Fornés

*Instituto de Matemática e Física, UFG, Caixa Postal 131, 74001-970, Goiânia, GO, Brazil.*

The intermitochondrial membrane space (IMMS) is narrow enough as to delimit a fluid region of molecular proportions which was equaled to a cubic volume with side varying between 10-70 nm. At this level fluctuations of thermodynamic parameters such as proton electrochemical potential may become important enough as to affect the molecular machinery embedded into the inner mitochondrial membrane (IMM). A calculation was undertaken to estimate the amplitude and duration of the proton-motive force (PMF) fluctuations across the IMM. Both the IMM and the IMMS are represented by an equivalent electrical circuit where the IMM resistance is  $R_m$  and its capacitance  $C_m$ . We estimate the buffer equivalent electrical capacitance,  $C_b$  considering an electrical analog of the buffer compartment associated with the IMMS. Coupling between the buffer and the membrane systems is expected to be of importance when both relaxation times are equal. We use this condition in order to calculate the access resistance between the membrane and the buffer systems, namely,  $\tau = \tau_m = \tau_b$ . The corresponding spectral density of the mean square of the fluctuational proton-motive force,  $[(PMF)^2]_\omega$  is given by:

$$[(PMF)^2]_\omega = \frac{\alpha''(\omega) 2kT}{|\alpha(\omega)|^2 \omega}$$

where  $\alpha'(\omega)$  and  $\alpha''(\omega)$  are the real and imaginary parts of the susceptibility and  $|\alpha(\omega)|^2 = [\alpha'(\omega)]^2 + [\alpha''(\omega)]^2$ . The calculated mean PMF reaches 150 mV with a size of 10 nm declining to about 40 mV for 70 nm. The relaxation times for these fluctuations range from  $2 \times 10^{-7}$  and  $5 \times 10^{-7}$  seconds. The lower end of the relaxation times is well within the time scale of molecular conformations and protonation-deprotonation reactions. This makes it feasible that fluctuations of PMF across the inner mitochondrial membrane may play a role in the modulation of the transporters thereby inserted.

## ESTUDO DA TRANSIÇÃO CONFORMACIONAL DO ÁCIDO POLIGALACTURÔNICO VIA TITULAÇÕES CONDUTIMÉTRICAS E SIMULAÇÕES MONTE CARLO

Jorge Chahine<sup>1</sup>, Marcelo A. Fossey<sup>1</sup>, Cecília C. M. dos Santos<sup>1,2</sup>, João Ruggiero Neto<sup>1</sup>

1 - Departamento de Física, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto, SP

2 - Instituto Adolfo Lutz, Laboratório I, São José do Rio Preto, SP

A transição conformacional em polissacarídeos com grupos ácidos fracos, é estudada através de titulações potenciométricas. As cargas residuais, oriundas da incompleta neutralização dos grupos ácidos, induzem mudanças conformacionais no sentido de distender a cadeia polimérica, cuja relativa flexibilidade contribui para viabilizar as alterações na conformação. Titulações condutimétricas foram realizadas para determinar a densidade linear de carga e portanto a distância (b) entre grupos carregados do ácido poligalacturônico em função do grau de ionização ( $\alpha$ ) da cadeia. Os dados experimentais mostram a transição conformacional na forma de um gráfico de b contra  $\alpha$ . E gráficos de b contra a concentração  $C_p$  do polímero e de  $\alpha$  em função do pH da solução, mostram a influência do meio na conformação do polissacarídeo. Esses dados são comparados com resultados obtidos através de simulações Monte Carlo. Os grupos ácidos são colocados nos sítios de uma rede cúbica formando um colar, utilizado como modelo para o polímero. A interação eletrostática entre os grupos carregados é descrita pelo potencial de Coulomb blindado na aproximação de Debye-Hückel. A influência do meio na interação entre os grupos é descrita adicionado-se o fator  $kT\Delta m_c(\text{pH} - \text{p}K_0)$  à energia eletrostática, onde  $\Delta m_c = +1$  ou  $-1$ , corresponde, respectivamente, à saída ou entrada de prótons na cadeia. Medidas da distância entre extremidades permitem estimar o valor da distância entre grupos, cujos resultados concordam muito bem com os dados experimentais.

**Palavras-chave:** polissacarídeos, transição conformacional, simulações Monte Carlo

**Apoio Financeiro:** Fapesp, CNPq e Fundunesp

## ESTRUTURA DOS SUBDOMÍNIOS DA SORO ALBUMINA HUMANA LIGADA A DIFERENTES LIGANTES

Giovanni Cesar dos Santos, Jenifer Nicoletti Neves e Johnny Rizzieri Olivieri

*Departamento de Física, IBILCE/UNESP, São José do Rio Preto, SP*

A Soro Albumina Humana (S.A.H.) é uma proteína de grande interesse biológico devido às suas propriedades como armazenadora e transportadora de outras substâncias. Contando com 582 resíduos de amino ácido, ela atua também no controle da pressão osmótica do sangue. Apesar de apresentar 17 pontes de dissulfeto, suas localizações permitem uma flexibilidade muito grande da cadeia. Sabe-se que a S.A.H. livre de ácidos graxos e outros ligantes, apresenta diferentes conformações em pH's variando entre 2.5 e 7.0. Modelos moleculares, baseados na estrutura de subdomínios, com diferentes configurações espaciais foram propostos, a partir de medidas de espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS).

Neste trabalho, procurou-se estudar a Soro Albumina Humana ligada a alguns tipos de ligantes, como ácidos graxos e drogas, mas num mesmo pH, em particular o pH 7.0. Usando-se também a técnica de espalhamento de raios-X a baixos ângulos, foram obtidas as curvas de intensidade e usando-se o método das Transformadas Indiretas de Fourier, foram calculadas as respectivas Funções Distribuição de Distâncias  $P(r)$ , que representam o número de pares de elétrons separados pela distância  $r$  e que contém as informações sobre o meio espalhador. Por outro lado, modelos teóricos têm sido construídos, conforme propostas anteriores para os diferentes pH's, e comparadas as Funções Distribuições teóricas com as obtidas experimentalmente. Os resultados tem mostrado que conforme o tipo de ligante usado, ela apresenta uma determinada conformação, sempre para um mesmo pH.

**Palavras-chave:** SAXS, Soro Albumina.

**Apoio Financeiro:** Fapesp, CNPq

## SOLUTION NONLINEAR POISSON-BOLTZMANN EQUATION FOR ERYTHROCYTE MEMBRANE

*André Calvet, Fernando S.D.S. Vilhena, Frederico A.O.Cruz e Célia Cortez Maghelly*  
Departamento de Ciências Fisiológicas, Universidade do Estado do Rio de Janeiro – UERJ

**Key words:** nonlinear Poisson-Boltzmann, erythrocyte membrane

By use MAPLE-algebraic software computation and numerical data from literature, we determined the analytical solution of nonlinear Poisson-Boltzmann equation that described a complex membrane model which takes account the lipidic bilayer and space distribution of fixed charges in the vicinity of membrane on molecules (glycocalix and spectrin layer molecules) associated to this bilayer. The lipidic bilayer was modelled by a dielectric film of thickness  $h$  and dielectric constant  $\epsilon_f$  which is limited by two surfaces. Associate to the inner surface there was the spectrin layer (thickness  $h_s$ ) and perpendicular to the outer surface there was the glycocalix (thickness  $h_g$ ). Both  $h_s$  and  $h_g$  cannot be considered to be small compared to the thickness of membrane as well as to the Debye-Huckel length. Therefore, the present model uses surface charge for the head groups of the phospholipids and space charges for the glycocalix and spectrin layer. The origin of the Cartesian coordinate axis was located at the bilayer center. We assumed that on both sides of the membrane the charges are distributed homogeneously along  $x$  and  $y$ -axes, thus the potential was dependent only  $z$ -coordinate. The charge densities of glycocalix and the spectrin along  $z$  was considered to be almost constant in the  $z$  direction. The integration of nonlinear Poisson-Boltzmann equation is very complex, hence we solve it for the particular erythrocyte case. The membrane potential profile of the erythrocyte is calculated on the basis of realistic data on the electric charges of the glycocalix and spectrin layers as well as of the lipidic bilayer. The potential electric profile for this complex model is presented.

(FAPERJ)

## DIAGRAMA DE FASES PARA UM MODELO DE REDE NEURAL HIERÁRQUICA

*Lourenço Couto B. de Miranda e Rosane Riera*

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

*Palavras-Chave:* rede-neural

Estudamos um modelo de redes neural recorrente, onde cada neurônio pode assumir 2 estados de atividade. Armazenam-se  $p$  memórias segundo a regra de Hebb. As memórias possuem configurações de atividade neural que são dotadas de uma estrutura interna pré-fixada (chamada de Hierárquica).

São feitas simulações do comportamento dinâmico tipo Glauber assincronizado e sequencial. As propriedades dinâmicas assintóticas de rede neural são analisadas através da média temporal das  $p$  correlações entre os estados sucessivos da rede com as memórias armazenadas. Obtem-se a bacia atratora das memórias assim como a distribuição de estados dinâmicos estáveis espúrios no espaço das configurações.

Obtem-se a capacidade crítica da rede ( $\alpha_c = p/N$ ) em reconhecer associativamente o maior número possível de memórias. O efeito do ruído é analisado, obtendo-se a curva  $\alpha_c(T)$  de separação de fases no plano  $\alpha \times T$ . Para  $T = 0$ , obtem-se  $\alpha_c = 0.34$ .

A mudança na estrutura interna das configurações representativas das memórias geram diferentes distribuições de sinapses na rede. Através delas analisa-se a influência da estrutura interna dos padrões armazenados sobre a curva crítica  $\alpha_c(T)$ . Os resultados são comparados com o modelo de Hopfield usual.

(CAPES, MCT)

## PADRÕES DO TIPO DBM NA MORFOGÊNSE NEURONAL

*Sidiney Geraldo Alves e Marcelo Lobato Martins*

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa - MG

*Palavras-Chave:* Fractais, Neurônios, DBM.

Cada gânglio, núcleo ou área cortical do sistema nervoso central é composto de uma variedade característica de células e de uma complexa e altamente ordenada malha de prolongamentos axônicos, dendríticos e glias cuja estrutura fina é adaptada para desempenhar uma atividade organizada específica. Essa malha, que fornece uma enorme área para contatos sinápticos e interações funcionais entre os neurônios, é de importância central na função de comunicação do tecido nervoso. Portanto a quantificação das características morfológicas dos dendritos e axônios neuronais, é um dos principais objetivos da neuroanatomia. Em particular, a capacidade de preenchimento do espaço pelas arborizações dendríticas dos neurônios foi objeto de vários estudos recentes baseados na medida de sua dimensão fractal.

Uma questão básica é descobrir quais fatores cumprem um papel relevante na geração das morfologias neuronais. Biologicamente sabe-se que a dinâmica dos cones de crescimento, estruturas localizadas nas pontas de cada neurito, é o determinante primário dessas morfologias. Em sua interação com o ambiente local, o crescimento e a ramificação dos cones de crescimento é regulada pela atividade elétrica dos neurônios e por neurotransmissores. Além disso, desde que a síntese e liberação dos neurotransmissores é rapidamente regulada pela atividade neuronal, a atividade elétrica se apresenta como o fator essencial a regular a morfologia dos neurônios.

Nesse trabalho propomos um modelo do tipo ruptura dielétrica (DBM) para descrever a morfologia básica dos neurônios, particularmente sua dimensão fractal, levando em consideração parte dos complexos detalhes do citoesqueleto e dos eventos citomecânicos que acontecem ao nível do cone de crescimento de cada neurito. Através de simulações computacionais mostramos que, variando-se os parâmetros do modelo, podemos obter morfologias características de certos tipos neuronais, o que sugere a possibilidade de, num nível físico mais fundamental, as formas dos neurônios serem determinadas por fatores inerentes a um processo de crescimento Laplaciano.

## APRENDIZAGEM ON-LINE NA MÁQUINA PARIDADE

*Roberta Simonetti e Nestor Caticha*  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* sistemas complexos, redes neurais, aprendizagem.

Muita atenção tem sido dada ao estudo de algoritmos de aprendizagem em redes neurais, pois estas máquinas apresentam propriedades que podem simular habilidades cognitivas de grande interesse, como memorização e generalização. Esforços têm sido feitos no sentido de se descobrir a melhor maneira segundo a qual uma rede pode aprender. Uma possível maneira de se estudar a teoria de aprendizagem em máquinas é através do estudo das propriedades estatísticas de redes mais simples. Neste trabalho estudamos um tipo simples de rede neural: a máquina paridade (MP), que foi introduzida por Mitchison e Durbin (1989). Trata-se de uma rede multicamada, constituída por um número  $N$  de entradas, conectadas às  $K$  unidades escondidas através do vetor sináptico e uma unidade de saída, que é o sinal do produto das representações internas da rede. Recentemente, foi publicado um trabalho (Kabashima, 1994) sobre a aprendizagem de uma máquina paridade utilizando de forma incremental um algoritmo conhecido como "Least Action Algorithm" (LAA). No nosso trabalho estudamos o aprendizado on-line na máquina paridade utilizando o algoritmo ótimo (Kinouchi e Caticha 1992). Nossos resultados mostraram-se superiores aos resultados obtidos por Kabashima em vários aspectos. Com este algoritmo a máquina paridade é capaz de generalizar à medida que os exemplos são apresentados, em oposição aos resultados anteriores, onde a rede passa por uma fase de memorização e depois começa a generalizar. Além disso, o erro de generalização decai com  $\alpha^{-1}$  ( $\alpha$  é proporcional ao número de exemplos), em oposição ao resultado de Kabashima onde este erro decai só com  $\alpha^{-1/3}$ . Enquanto que o LAA não tolera ruídos superiores a um valor crítico, nosso algoritmo aprende de forma eficiente ( $1/\alpha$ ) e robusta, pois não apresenta esta limitação.

(CNPq)

## DILUTION IN A BOOLEAN NEURAL NETWORK

*Daniela M.L. Barbato*

Departamento de Física e Informática  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*J. F. Fontanari*

Departamento de Física e Informática  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Key words:* dilution, noise, perceptron

The problem of lesioning the network after the learning stage has finished, has remained practically untouched. The main motivation of this type of analysis is the identification of the components whose destruction may affect more severely the generalization performance of the neural network. The generalization error is defined as the error made on a new example, independent of the ones used in training. We compare the generalization performance of a diluted boolean perceptron in three cases:

- The weights are given by the Hebb rule;
- The weights are given by the pseudo-inverse rule;
- The weights are given by optimal perceptron rule;
- The weights minimize the Gardner-Derrida energy (Perceptron rule).

Besides dilution, we also investigate the effects of static noise corrupting the patterns presented to the perceptron in the learning stage.

(CNPq)

## **O Modelo Geronte na Avaliação da Autonomia de Idosos: Um Modelo Usando Redes Neurais**

*Gilberto Luiz de Souza Paula(FAMB - FFCCLRP/USP)*  
*Antônio Carlos Roque da Silva Filho(FAMB - FFCCLRP/USP)*  
*Wilson Kraemer de Paula (Depto de Enfermagem - UFSC)*

*Palavras Chave: autonomia, desempenho, padrões*

O modelo *Geronte*, desenvolvido na Faculdade de Medicina de Lyon, avalia a autonomia (auto-suficiência) de pacientes idosos através de observações dos seus desempenhos nas atividades da vida diária, classificando-os em seis setores: a) mental, b) sensorial, c) corporal, d) locomotor, e) social doméstico interno e f) social doméstico externo. Neste trabalho, constrói-se uma rede neural artificial do tipo rede de Hopfield para implementar o modelo *Geronte*. A rede parte de uma base de duzentos e setenta neurônios, que descrevem o estado de autosuficiência do paciente. Após algumas interações, a rede deve reconhecer os seis setores usados pelo modelo *Geronte*, descrevendo portanto se a situação do paciente é boa ou não. O treinamento da rede é feito a partir de uma base de dados levantada por estudantes do Departamento de Enfermagem da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) sobre idosos em uma comunidade de Florianópolis. A classificação fornecida pela rede é comparada com os resultados obtidos pela equipe da UFSC, a qual utilizou métodos de avaliação subjetivos. O uso de uma rede neural para efetuar este tipo de classificação vem na tentativa de fornecer um auxílio na tarefa de reconhecimento de padrões de auto-suficiência nos idosos, otimizando o processo de enfermagem (e por consequência de custo operacional), bem como de tornar mais uniforme e objetiva a anotação dos níveis de desempenho nas atividades desenvolvidas pelos idosos.

Projeto financiado pela CAPES e FAPESP

## **Memória, Emoções e Necessidades Um Modelo Usando Redes Neurais Artificiais**

*Gilberto Luiz de Souza Paula e Antônio Carlos Roque da Silva Filho*  
FAMB - FFCLRP / USP

*Palavras -Chave: Cognição, Emoção, Necessidades*

Muitos processos cognitivos são influenciados por mecanismos de reforço. Tais mecanismos como, por exemplo, opiniões e convívio social entre outros, têm uma relação com mecanismos cognitivos no sentido de reforçar um dado fato na memória, fazer com que recordemos facilmente algo relacionado a uma situação desagradável, ou nos levar a reagir a uma situação inconscientemente. Não somente na armazenagem de dados na memória, mas também durante uma tomada de decisão ou na atenção dispensada a alguma atividade, sofremos influência destes mecanismos. Com o objetivo de implementar um modelo computacional para a memória cuja performance seja influenciada simultaneamente por fatores cognitivos e não cognitivos propõe-se um modelo de redes neurais artificiais no qual coexistem duas redes em interação: uma cognitiva e outra não cognitiva. Fazemos uma avaliação de como processos não cognitivos podem influenciar a memória; faremos uma descrição de um modelo emotivo, como exemplo de uma rede não cognitiva, com os elementos requeridos por ele. Cada uma das duas redes (emotiva e cognitiva) será modelada por uma rede de Hopfield. Em seguida, será acrescentado às equações um termo de estado cognitivo/emotivo, indicando a inter-relação entre as duas redes, ou seja, que não só a cognição sofre influência da emoção mas também a emoção pode ser influenciada pela cognição. Por outro lado, introduziremos o conceito de necessidades básicas: o que são, quais os modelos e quais os processos cognitivos influenciando no estado de necessidades. Um estado emotivo será descrito com base nas necessidades e no modelo de redes neurais artificiais escolhido para, finalmente, se oferecer uma proposta de descrição de estados comportamentais com base nas necessidades influenciando a cognição.

Projeto financiado por CAPES e FAPESP

## THE ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS APPLICATION IN THE CHARACTERIZATION OF BRAIN SIGNALS IN THE VARIOUS PHASES OF THE HUMAN SLEEP

Ernane J. X. Costa, Jean Zouki Jr. and Euvaldo F. Cabral Jr.

SAD - LCS - PEE  
EPUSP

*Palavras-chave:* artificial neural networks, sleep, EEG

The background electrical activity of the brain in unanaesthetized animals was described qualitatively in the nineteenth century, but it was first analyzed in a systematic manner by the German psychiatrist Hans Berger, who introduced the term electroencephalogram (EEG) to denote the potential fluctuations recorded from the brain. In general there is a relationship between the degree of cerebral activity and the average frequency of the EEG rhythm, the frequency increases progressively with higher and higher degrees of activity. For example, delta waves are frequently found in stupor, surgical anesthesia and sleep; theta waves in infants; alpha waves during relaxed states; and beta waves during intense mental activity. The analyze of a beam of signals originated in the human brain during the different sleep phases and its posterior interpretation through the use of Artificial Neural Networks techniques combined with other Digital Signal Processing techniques is the main objective of this work. The brain signals collected from a EEG are introduced in an artificial neural network and after learning the patterns of the different sleep levels the network can identify an arbitrary level and classify it. This methodology may be used to control any device that are triggered by certain level of sleeping activity. This work present a straightforward application in helping theoretical studies of the human sleeping brain activity. In terms of data acquisition EEG signals has been used but an improvement has been envisaged through the development of a multi-electrode acquisition system. This new development will allow a much better characterization of the brain processes.

(CNPq)

## LEARNING A SPIN GLASS

*Silvia M. Kuva, Osame Kinouchi and Nestor Caticha*

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Key words:* neural networks, spin glass, learning algorithms.

Up to now generalization tasks in Neural Networks using the teacher-student scenario have been studied only in perceptron-like devices. Here we introduce this kind of problem in the framework of spin systems and attractor neural networks. A teacher network with  $N$  fully connected neurons  $S_i = \pm 1$  with synaptic couplings  $B_{ij} = \pm 1$  uniformly distributed, with  $B_{ii} = 0$  and  $B_{ij} = B_{ji}$  defines a spin-glass energy surface. We generate a set of "examples"  $\{\xi^\nu\}$ ,  $\nu = 1, \dots, P$ , that are randomly chosen local minima on the energy surface of the teacher network. The student task is to reproduce the whole energy surface of the teacher, by using only the information contained in the set  $\{\xi^\nu\}$ . Its performance is measured by  $\rho$ , which is the average overlap between the student and teacher coupling matrices. We have obtained learning curves for different online learning algorithms: a.) Hebb: The student net cannot generalize. The order parameter  $\rho$  gets into a stationary value at  $\rho \approx 0.52$ ; b.) Perceptron: The generalization error may be estimated by the deviation  $1 - \rho$ , which decreases as a power law of the normalized number of examples  $\alpha = P/N$ ; c.) Bayes: The Bayesian online limit is determined and has also a power law behavior for the deviation  $1 - \rho$ . We conclude that it is possible to infer the teacher hamiltonian, which has an exponentially large number of minima, by using the information of a small (order  $N$ ) fraction of them.

(CNPq)

## ESTUDO EMPÍRICO DA ESTABILIDADE DOS MÍNIMOS GLOBAIS EM REDES NEURAIS COM APRENDIZADO POR *BACKPROPAGATION*

*Renato Glauco de Souza Rodrigues, Carlos Alberto Pelá  
e Antonio Carlos Roque da Silva*  
Departamento de Física e Matemática - FFCLRP-USP

*Palavras-chave: Backpropagation, Redes Neurais, Estabilidade*

A motivação para este trabalho surgiu das dificuldades encontradas na aplicação do algoritmo *backpropagation*, com unidades contínuas, em problemas que requerem redes neurais de dimensão muito grande. Em redes pequenas (como as capazes de aprender combinações de funções trigonométricas por exemplo), existe a probabilidade de que uma dada inicialização não permita a convergência da rede para uma solução aceitável. Em redes grandes (como as que nós utilizamos em um problema de reconstrução tomográfica com 1296x2000x1296 unidades neuronais), a maior parte das tentativas de inicialização fracassam. Na tentativa de entender a relação entre a inicialização dos pesos e a convergência para um mínimo ótimo, construímos uma função a partir de uma rede neural com dimensão 1x3x1. Desta forma a função é representada de forma exata pelo conjunto de pesos que a gerou. A rede é reinicializada e colocada em treinamento até obtermos uma boa aproximação. Este processo foi repetido diversas vezes, e os pesos encontrados foram comparados com os pesos originais. Nenhuma relação foi encontrada entre estes pesos. Isto mostra que existem múltiplas soluções razoáveis para um dado problema. Mesmo nessa rede pequena, o algoritmo conduz muitas vezes a pesos que não são solução para o problema. Esta é uma prova empírica da existência de mínimos espúrios. Introduzindo ruídos de amplitude crescente nos pesos originais dessa rede, foi possível verificar que dentro de um determinado erro, o sistema sempre converge para a solução original, e que uma inicialização fora deste erro conduz a outras soluções ou à não convergência. Este estudo permitiu identificar a importância da inicialização, principalmente em redes de grande porte e nos direcionou na busca de algoritmos que melhorem a inicialização.

(CNPq, FAPESP e CAPES)

## CATEGORIZATION ON PSEUDO-INVERSE NEURAL NETWORKS

*Camilo Rodrigues Neto*  
Departamento de Física e Informática  
Instituto de Física de São Carlos - USP  
*J. F. Fontanari*  
Departamento de Física e Informática  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Key words: categorization, pseudo-inverse, neural networks*

Neural Networks may be used to implement associative memories, which have the property of recovering a previously stored pattern, even when exposed to partial or degraded information of that pattern. The categorization ability is the capacity of, after being exposed to a given set of examples, creating a representation for the corresponding or associate concept. Categorization emerges spontaneously from the behavior of the net.

In this study we investigate the emergence of categorization in the pseudo-inverse neural networks as the number of examples and their correlations are varied.

(CNPq)

## GENERALIZAÇÃO COM RUÍDO NO MODELO DE HOPFIELD SIMETRICAMENTE DILUÍDO

*Paulo Roberto Krebs*

Instituto de Física e Matemática - Universidade Federal de Pelotas

*Walter Karl Theumann*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

*Palavras-Chave:* redes neurais, modelo de Hopfield, generalização

A criação espontânea de estados atratores que representam as informações (conceitos) comuns a um conjunto de padrões (exemplos) é chamada de capacidade de generalização. Neste trabalho estudamos o efeito da temperatura (ruído sináptico) na capacidade de generalização quando a rede é diluída simetricamente. Para diluição simétrica é possível definir uma função energia e utilizar os métodos convencionais da mecânica estatística para obter as equações para os parâmetros de ordem dentro da aproximação de simetria de réplicas. A partir da solução numérica das equações dos parâmetros de ordem obtivemos as curvas de generalização e os diagramas de fases para diferentes valores do ruído sináptico e da conectividade. Observamos que o aumento da diluição permitia a rede encontrar a fase de generalização com um número cada vez menor de exemplos. Também observamos o crescimento da fase de generalização sobre a fase de vidros de spin. A comparação destes resultados com os obtidos para o caso de uma rede completamente conectada (P. R. Krebs e W. K. Theumann, *J. Phys. A* 26, 3983 (1993)) permite concluir que, apesar do ruído sináptico desfavorecer a generalização no caso de um número macroscópico de conceitos, a diluição favorece fortemente a generalização mesmo nos casos em que o ruído sináptico é alto.

## PERCEPTRON COM FUNÇÃO DE TRANSFERÊNCIA NÃO LINEAR

*Roberta Simonetti, Cristiano R. de Mattos e Nestor Caticha*

Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* redes neurais, perceptron, generalização.

Um problema central em redes neurais está relacionado às questões de memorização e de generalização. De maneira bem simples, uma rede neural (*perceptron*) pode ser definida como um vetor (sináptico) e uma função de transferência,  $\mathcal{F}$ . Esta função determina um mapeamento: a cada exemplo é associada uma resposta. A função de transferência depende dos campos locais,  $h_j$ , obtidos a partir do vetor sináptico e do vetor apresentado à rede (exemplo).  $\mathcal{F}$  pode ser o sinal dos campos locais (*perceptron booleano*); pode assumir diretamente o valor dos próprios campos (*perceptron linear*), ou pode depender destes campos de forma mais complexa. Neste trabalho estudamos o problema da generalização num perceptron cuja função de transferência é dada por,  $\mathcal{F}(x) = \text{sign}[(h+K)h(h-K)]$ . O processo de aprendizagem consiste basicamente na determinação das componentes do vetor sináptico, que permite a implementação de uma dada regra, isto é, de obter um mapeamento específico. Esta regra pode ser aleatória ou determinada por uma rede especial, denominada professor. A existência de uma regra caracteriza o aprendizado como supervisionado. No caso do aprendizado supervisionado com professor, é possível definir o *overlap*, que mede a distância entre as duas redes, isto é, entre o professor e a rede que se quer ensinar (aluno). Numa primeira análise, verificamos que o erro de generalização é uma função monotônica do *overlap*, o que nos permite utilizar o método variacional para obter a função modulação ótima que determina as modificações a serem feitas no vetor sináptico. Além da função modulação ótima, obtivemos as equações de evolução do *overlap* e do módulo do vetor sináptico, em função dos exemplos apresentados. Estas equações têm a mesma forma funcional das equações obtidas no estudo de redes mais complexas, como a máquina comitê e paridade. (CNPq)

## USING NEURAL NETWORKS FOR NAVIGATION

*Marco A. P. Idiart*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Av. Bento Gonçalves 9500, 91501-970, Porto Alegre - RS - Brasil

*Palavras-Chaves:* neural networks, hebbian learning, place-cells.

Place-cells are neurons whose activity depends on the position of the animal in the environment. An ensemble of place-cells, therefore, forms a map of the environment - positions can be decoded from neural activity. If these cells are connected through Hebbian synapses in a network, the network can learn trajectories in the environment. The recall of a trajectory is done by the recognition of the current position and the recall of the next position. For each map only a single trajectory can be learned. Two trajectories in the same map superpose destructively.

The network can store preferred positions instead of trajectories. In this case, it is demonstrated that many positions can be stored using the same map. They are fixed points in the dynamics of the "animal" and the space ( two-dimensional ) is divided in many basins of attraction. Two preferred positions can merge if they are too close. How close they have to be to merge depends on the size of the place-fields of the cells.

The formation of place-cells is also modeled. Unsupervised learning is applied to a feed-forward network that receive as inputs temporal patters that simulate motion in the environment. The network that generates the place-cells is such that the map is stable to small changes in the environment, but if a drastic change occurs, a complete new and different map is produced. In this situation the connections among place-cells, modified to store a previous path (or position), are now ineffective to recall this path (or position), and a new trajectory can be learned without interference.

(CNPq)

## OTIMIZAÇÃO DE ALGORITMOS DE APRENDIZAGEM ON-LINE EM REDES NEURAIS TOTALMENTE CONECTADAS

*Renato Vicente, Mauro Copelli, Nestor Caticha*

Departamento de Física Geral, Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* rede neural, on-line, algoritmo.

O problema do aprendizado supervisionado consiste em inferir uma regra a partir de exemplos aleatoriamente gerados. A regra a ser inferida é definida pelas conexões sinápticas da rede neural "professor", que gera os exemplos (pares entrada-saída). A rede neural que tenta implementar a regra é chamada de "aluno", que só tem acesso aos exemplos para efetuar suas mudanças sinápticas. No aprendizado "on-line" um exemplo é apresentado por vez, sendo descartado após um ajuste infinitesimal das sinapses da rede "aluno". A taxa com que o erro de generalização diminui com o número de exemplos pode ser otimizada através de uma escolha apropriada do algoritmo de aprendizagem. Esta otimização de algoritmos foi aplicada com sucesso em arquiteturas mais simples como o perceptron e as máquinas comitê e paridade com estrutura de árvore. A arquitetura abordada neste trabalho tem uma camada escondida e, mais importante, todos os ramos totalmente conectados. Neste caso, surgem parâmetros de ordem adicionais que refletem as novas correlações introduzidas (por exemplo, entre os campos receptivos do aluno, o que não acontece nas máquinas com estrutura de árvore), dos quais depende o erro de generalização. As equações de evolução média dos parâmetros de ordem são escritas como função de um algoritmo arbitrário. Uma vez que a dependência dos parâmetros de ordem em relação ao algoritmo de aprendizagem é funcional, efetuamos o cálculo variacional que otimiza a taxa de variação do erro de generalização. Verificamos que os algoritmos referentes aos diferentes ramos da máquina podem ser obtidos a partir de um sistema linear cuja matriz associada pode ser facilmente invertida desde que se imponha a simetria de ramos.

(CNPq, FAPESP)

## TRION MODEL: NUMERICAL SIMULATION RESULTS

Karim Aquere Filho\*, Jorge Quillfeldt\*\* e R.M.C. de Almeida\*

\*Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
C.P. 15051 - 91501-970 Porto Alegre, RS, Brazil

\*\*Instituto de Biociências - Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
e-mails: Karim@if.ufrgs.br, Quillfe@if.ufrgs.br, Rita@if.ufrgs.br

The trion model was proposed by Shaw and collaborators<sup>1</sup> to simulate the cooperative behavior found in the brain by considering the architecture suggested by Mountcastle's organizational principle of neocortical function. It considers a one dimensional network of three state spins or trions  $S_i = -1, 0, +1$  for  $i=1, \dots, N$  and a synchronous dynamics given by

$$S_i(t) = \sum (V_{ij} S_j(t-1) + W_{ij} S_j(t-2)) ,$$

where  $V_{ij}$  and  $W_{ij}$  are couplings between  $S_i$  and its first and second neighbors in the two preceding time steps. We present the results obtained from large networks and verify that the system shows a rich nontrivial dynamical behavior.

1. G.L. Shaw, D. J. Silverman and J.C. Pearson, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **82** (1985) 2364.

## APLICAÇÃO DO MODELO BOOLEANO A POPULAÇÕES SEXUADAS

*Suzana Moss de Oliveira, Paulo Murilo C. de Oliveira,  
Thadeu J.P. Penna e Jorge de Sá Martins*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* envelhecimento biológico, reprodução sexuada, booleano.

O Modelo Booleano para simular o envelhecimento biológico, apesar de recentemente introduzido [T.J.P. Penna, *J. Stat. Phys.* **78**, 1629 (1995)], vem sendo largamente aplicado para explicar diferentes aspectos da evolução: 14 artigos, de 95 até março de 96. Um dos mais importantes resultados obtidos é o de que a taxa de sobrevivência de uma espécie depende fortemente das idades mínima e máxima de reprodução [T.J.P. Penna, S. Moss de Oliveira e D. Stauffer, *Phys.Rev.* **E52**, 3309 (1995)]. Espécies como a do Salmão, por exemplo, que só reproduzem uma única vez por volta dos 8 anos de idade, não conseguem sobreviver até os nove anos. Tal resultado pode ser visto como uma consequência direta da teoria de Darwin, que prediz que a seleção natural tem como objetivo único a preservação das espécies. Contudo, diante disto, como explicar o fato das taxas de sobrevivência do homem e da mulher serem as mesmas, se a mulher deixa de reproduzir a partir dos 50 anos? Para tentar encontrar a resposta, adaptamos o Modelo Booleano a populações sexuadas. Neste trabalho explicamos como esta adaptação pode ser feita utilizando-se a técnica de "multispin coding", e ainda que pelo fato do sexo não ser transmitido geneticamente, toda a população acaba apresentando a mesma taxa de sobrevivência, que vai muito além da idade máxima da reprodução da mulher.

(CAPES, CNPq, FAPERJ e FINEP)

## THEORETICAL APPROACH TO BIOLOGICAL AGEING

R.M.C. de Almeida\*, S. Moss de Oliveira\*\* and T.J.P.Penna\*\*

\*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
C.P.15015, 91501-970 Porto Alegre RS

\*\*Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense  
C.P. 100296, 24210-340 Niterói, RJ

We consider the bit-string model for biological ageing and consider both iteroparous and semelparous populations. Each individual in the population is represented by a bit string. The bits correspond to the information about the health status at different ages, that is, when the first bit is one that means a disease acts at age 1. Each individual can accumulate up to  $T$  diseases along its life: at the  $T$  disease it dies. The individuals reproduce giving birth to offsprings with essentially the same bit-string, that may have suffered some mutations. Mutations are taken into account through transition matrices, and two cases are considered: bad and good mutations are equally possible and only bad mutations are allowed. The evolution equations are solved by numerical iterations and we obtain exact results for the age structure of the population for arbitrary number of mutations  $M$  and maximum number of diseases  $T$ . The results are in perfect agreement with simulations. In the case of only bad mutations we also present the analytical solution for the stationary solution, that is the only solution for  $M \neq 0$ .

## INFLUÊNCIA DA DIVERSIDADE E DISTRIBUIÇÃO ESPACIAL EM SISTEMAS EPIDÊMICOS

*Claudia B. dos Santos; Antonio Caliri*

FFCLRP - Dep. de Física e Matemática e FCFRP - Dep. de Física e Química  
Universidade de São Paulo - Ribeirão Preto

*Palavras-Chave:* Monte Carlo, distribuição de clusters, propagação epidêmica

A propagação de agentes dissimuladores de moléstias depende, essencialmente, da habilidade daqueles em sobreviverem/reproduzirem em seu meio. Esse processo pode ser estudado de forma fenomenológica através do emprego do princípio estocástico da "chance de contágio" entre o agente patogênico e os indivíduos infectáveis. Fatores tais como topologia do sistema, sua homogeneidade, grau de diversidade entre os indivíduos presentes, virulência e quantidades de agentes infectantes, pertinentes à moléstia em questão, influenciam marcadamente na possibilidade individual de infecção e quando considerados em conjunto, associam a cada indivíduo uma chance  $s_i$  de se infectar. Suscetibilidade passa a ser descrita então como uma variável contínua entre zero e um onde qualquer valor intermediário é interpretado como a soma de todos os possíveis fatores, intrínsecos ou não à especificidade da doença, que redundam em uma probabilidade de infecção  $p_i$  - durante uma unidade de tempo - para cada elemento  $i$  da população. Dessa forma define-se um perfil suscetibilidade (ou risco) para cada população. Nesse trabalho, analisamos um modelo no qual a população é composta por duas variedades de suscetíveis - quanto a sua chance de contágio - cuja distribuição geográfica pertence a diferentes categorias, tais como mistura aleatória e arranjo concêntrico. Cada um dos elementos é localizado no espaço (bi-dimensional) e o agente infectante propaga-se por entre os mesmos segundo condições específicas e o tipo de contato entre eles. Como um dos resultados dessa investigação, determinamos o perfil de suscetibilidade da população resultante do modelo considerado. A dinâmica do processo epidêmico é determinada por simulação tipo Monte Carlo.

(CAPES)

## POPULATION GENETICS APPROACH TO MOLECULAR EVOLUTION

*Alves, D. and Fontanari, J. F.*  
Instituto de Física de São Carlos – USP

*Palavras-Chave:* natural selection, population dynamics, quasi-species model.

We investigate the classical quasi-species model for evolution through natural selection employing a populational genetics approach, which deals directly with the monomers frequencies in an ensemble of heteropolymers rather than kinetic rates. This allows us to investigate the quasi-species model in a more straightforward way, obtaining new insights in how the structure of the quasi-species may be changed by the complexity of the replication landscape. In particular, we characterize, in great detail, the error threshold for the existence of quasi-species, above which the driving of natural selection is completely eliminated by the random perturbations due to the mutation. The behaviour pattern of this threshold is studied as a function of the various parameters of the system as, sequence length, distributions of selective values, population size and the number of distinct monomers. Analytical results are given for both asexual and sexual reproduction scenarios.

(CNPQ)

## ESTRATÉGIAS DE REPRODUÇÃO E LONGEVIDADE

*A.Racco, M. Argollo de Menezes, T.J.P.Penna*  
Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* envelhecimento biológico, evolução, dinâmica de populações

O envelhecimento, ou senescência, é um fenômeno biológico que ocorre em todos os organismos mais desenvolvidos. O declínio nas capacidades funcionais tais como o metabolismo, resposta a estímulos e capacidade de reprodução em algumas espécies. Existem várias teorias sobre o envelhecimento biológico. A hipótese do acúmulo de mutações admite que alelos com mutações deletérias agindo em idades específicas serão mais frequentes em idades mais altas em consequência da pressão da seleção natural. Um modelo booleano para o envelhecimento biológico recentemente proposto (Penna, *J.Stat.Phys.* 78, (1995) 1629), baseado na teoria de acúmulo de mutações tem sido bem sucedido na reprodução das curvas de sobrevivências reais de várias espécies e outras várias aplicações (ver “Aplicações do modelo booleano para envelhecimento biológico”, nesta conferência). Apesar de particularmente adequado para implementação computacional (Penna e Stauffer, *Int.J.Mod.Phys. C* 6, (1995) 233) já foram encontradas soluções analíticas e exatas para algumas aplicações. Entretanto, além do estudo sobre o fenômeno conhecido como “oldest old” (Moss de Oliveira *et al.*, *Physica A* 221, (1995) 453), pouco se sabe sobre a determinação da expectativa de vida das espécies. Neste trabalho estudamos como a expectativa média de vida de uma população depende da estratégia de reprodução, isto é, em que idade se dá o amadurecimento e como varia a fertilidade com a idade. É conhecido o fato que árvores e algumas espécies de peixes cuja fertilidade aumenta com a idade possuem expectativa de vida maiores que as de outras espécies (Partridge e Barton, *Nature* 362 (1993) 305). Conseguimos mostrar, neste trabalho, que resultado é reproduzido neste modelo. Apresentaremos também uma proposta de experiência para a comprovação da teoria de acúmulo de mutações, através da observação de plátos em curvas de sobrevivência para espécies iteróparas que se reproduzem em intervalos bem definidos de tempo (como as estações do ano).

## SIMULAÇÃO MONTE CARLO DE UM MODELO IMUNOLÓGICO

*Wandemberg Paiva Ferreira e Antonio Fernandes Siqueira*

Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará

Fortaleza Ceará Brasil

*Palavras-chave:* processos estocásticos; simulação; sistema imunológico

A resposta imunológica às células estranhas ao organismo animal se dá através de células específicas. Dependendo do tipo de antígeno presente, os linfócitos  $T_0$  desenvolvem a célula apropriada no combate ao corpo estranho. Verifica-se que essencialmente dois tipos de células auxiliares  $T_H$  são produzidas, sendo portanto responsáveis pela proteção adequada. Neste trabalho consideram-se antígenos do tipo  $A_1$  que ao interagirem com as células  $T_0$  transforma-as em células assassinas  $T_{H1}$ , enquanto antígenos do tipo  $A_2$  promove o aparecimento de células  $T_{H2}$  a partir da interação com células  $T_0$ . Os antígenos fazem-se presentes em um nodo de defesa com probabilidade  $p_1$  se  $A_1$  está presente e  $(1 - p_1)$  se  $A_2$  é o antígeno em ação. O processo de duplicação de cada célula se dá em tempo característico que corresponde a um dado número de iterações Monte Carlo. Além disso segundo o nosso modelo o estado de um linfócito pode ser modificado pela sua vizinhança. Consideramos um nodo de defesa constituído inicialmente, por um número  $N$  de linfócitos  $T_0$  distribuídos em uma rede cúbica. Os antígenos entram nos sítios do nodo linfático aleatoriamente podendo interagir com as células presentes quer sejam do tipo  $T_0$  ou  $T_{Hk}$  ( $k = 1, 2$ ). A situação de estabilidade das populações de células  $T_{H1}$  e  $T_{H2}$  é obtida em três situações de densidade de antígenos: a) baixa ; b) média e c) alta densidade.

UFC, CNPq e FINEP

## ALGUNS ASPECTOS DO EFEITO DA CONDENSAÇÃO DE FRÖHLICH EM BIOSISTEMAS

*Ricardo Antônio Mosna, Marcus Vinicius Mesquita e Mário Alberto Tenan*

Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais

Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

*Palavras-Chave:* sistemas dinâmicos, sistemas dissipativos, termodinâmica de não-equilíbrio

Neste trabalho, estudamos o fenômeno da condensação de excitações nos modos polares de vibração de mais baixa energia do espectro de biosistemas, um fenômeno que lembra o da condensação de Bose-Einstein. Este efeito, que parece ter relevância em bioenergética, pode se manifestar em biomateriais abertos governados por equações cinéticas não lineares, quando submetidos a uma fonte de energia metabólica. Aqui analisamos o comportamento do sistema, (i) tanto no regime transitório antes do estabelecimento do estado estacionário, (ii) quanto durante a relaxação para o equilíbrio termodinâmico, após ter cessado o bombeamento externo de energia. Considerando-se o caso ilustrativo em que somente os modos polares de maior energia são bombeados, mostramos que em ambos os estágios transitórios as interações anarmônicas entre a cadeia e o meio elástico induzem uma rápida troca de energia entre os modos de alta energia e aqueles (de baixa energia) nos quais ocorre o efeito da condensação. Verificamos que durante o processo de bombeamento, inicialmente apenas a população dos modos bombeados cresce rapidamente. Transferências consideráveis de energia para os outros modos ocorre somente após a população dos modos bombeados ter atingido um valor crítico. Para o estágio transitório de relaxação ao equilíbrio termodinâmico, encontramos duas escalas de tempo caracterizando a evolução da população dos modos de alta energia.

(FAPESP, CNPq)

## ATRATOR ESTRANHO NÃO-CAÓTICO NUM MODELO PARA NEURÔNIO

*André S. Cassol e Marcelo H. R. Tragtenberg*

Departamento de Física da Universidade Federal de Santa Catarina

*Palavras-Chave:* atratores estranhos não-caóticos, sistemas não-lineares, mapeamentos

Recentemente, foi proposto por Kinouchi e Tragtenberg um modelo para neurônio baseado num mapeamento bidimensional discreto, ou seja um neurônio com dois auto-acoplamentos: o primeiro com seu estado anterior e o segundo com seu estado ante-anterior. Este mapa inicialmente correspondia à solução de um análogo do modelo ANNNI na rede de Bethe, proposto no contexto de sistemas magnéticos com ordem modulada. Este modelo de neurônio, para certos valores dos parâmetros, pode ser visto como um oscilador não-linear em tempo discreto, na medida em que possui comportamento periódico. O estudo de osciladores não-lineares forçados, com frequências externas comensuráveis ou não com a frequência natural do oscilador, tem atraído muita atenção. Em osciladores contínuos ou discretos com frequência externa incomensurável com a natural foi observada a ocorrência de objetos conhecidos na literatura como atratores estranhos não-caóticos (AEN). Os AEN são atratores caracterizados por seu maior expoente de Lyapunov igual a zero e sua dimensão de Hausdorff próxima de dois, entre outras medidas. Isto ocorre de forma análoga com o oscilador harmônico forçado por força externa com frequência incomensurável com a do oscilador, para o qual o atrator tem dimensão dois. No entanto, obtivemos resultados para o modelo de neurônio forçado por um estímulo externo senoidal com frequência *comensurável* com a frequência natural um atrator estranho não-caótico, que pode ser caracterizado por seu maior expoente de Lyapunov igual a zero e dimensão de Hausdorff próxima de dois. Isto equivaleria a obter, para o oscilador harmônico forçado por uma frequência comensurável com a sua frequência natural de oscilação, um atrator bidimensional e não uma figura de Lissajous. Não há, na literatura, resultado semelhante para AEN.

## ARMADILHA MAGNETO-ÓPTICA USANDO FORÇAS DE VÓRTICE

*M. T. de Araujo<sup>a</sup> e I. Guedes<sup>b</sup>*

<sup>a</sup> Departamento de Física - UFAL

<sup>b</sup> Departamento de Física - UFC

**Palavras-chave:** armadilha, aprisionamento, magneto-óptica

Nos últimos anos, muitos avanços têm ocorrido em experimentos de resfriamento e aprisionamento de átomos neutros. Toda a teoria que possibilita a compreensão destes efeitos, bem como sua consequente comprovação com os dados experimentais, é baseada no uso da componente espontânea da força de pressão de radiação. Assim, devido a este conceito, pode-se hoje em dia, aprisionar átomos neutros em armadilhas magneto-ópticas (AMO) e obter-se amostras com densidades da ordem de  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$  e temperaturas muito menores que  $T=240 \mu\text{K}$ . Embora as características da AMO possibilitem a realização de um grande número de experimentos, existe, devido a sua geometria, um problema causado pelo surgimento da força de confinamento da radiação. Esta força, faz com que a medida em que aumentamos o número de átomos na AMO, estes átomos comecem a repelir-se ocasionando, assim, uma expansão da nuvem de átomos aprisionados e consequentemente uma redução no valor da densidade. Assim é extremamente importante tentar novas geometrias para a AMO, de forma que possamos reduzir o efeito da força de confinamento da radiação e conseguirmos valores maiores para a densidade de átomos aprisionados. Neste trabalho, vamos demonstrar como, mesmo em 3-D, podemos reduzir o efeito da força de confinamento da radiação. Para isto, vamos nos valer do conceito de força de vórtice. Esta força surge devido ao desbalanço da intensidade, causado pelo desalinhamento geométrico dos feixes lasers de aprisionamento na AMO. Descreveremos a dinâmica de aprisionamento para átomos nesta nova configuração de AMO e calcularemos através de um modelo numérico o número de átomos aprisionados. Discutiremos, também, a eficiência entre as duas armadilhas mencionadas.

## CONSTRUÇÃO DE ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS UTILIZANDO LASERS DE DIODO ESTABILIZADOS

*Clayton A. Benevides, Sandra S. Vianna, José W. R. Tabosa*

Departamento de Física - UFPE

**Palavras-chave:** laser de diodo, armadilha magneto-óptica, cavidade externa.

Motivados pelo campo de pesquisa aberto pelas Armadilhas Magneto-Ópticas, o presente trabalho vem apresentar uma solução barata na construção dessas armadilhas. Escolhendo lasers de diodo para a construção da armadilha, o custo do aparato experimental cai bastante, em compensação, esses lasers necessitam de toda uma instrumentação que os capacite a ter estabilidade e largura de linha adequadas as necessidades espectroscópicas. Para a estabilização primária do laser de diodo, construímos controladores de corrente e temperatura ( com precisão em torno de  $1 \mu\text{A}$  e  $1 \text{mK}$  respectivamente), que permitem operar o laser com largura de linha em torno de 30MHz. Entretanto, para a operação da armadilha a largura de linha do laser deve ser reduzida a 1MHz. Isto foi conseguido com o uso de uma cavidade externa contendo uma grade de difração de 1200linhas/mm na configuração Littrow. A frequência do laser é então colocada abaixo da frequência de ressonância da transição  $6S_{1/2}, F=4 \rightarrow 6P_{3/2}, F=5$  do Césio 133 através de um sinal de absorção saturada, que permite resolver a linha com resolução sub-Doppler. Para realização da armadilha, montamos uma célula com reservatório de Césio a  $10^{-6}$ Torr de pressão. Usando uma configuração de armadilha de 3 pares de feixes contrapropagantes e ortogonais, mais um campo magnético de gradiente linear com o zero do campo no cruzamento dos feixes, conseguimos obter o aprisionamento de átomos. A estabilidade da armadilha depende da estabilidade do laser de cavidade externa e para eliminarmos as flutuações, montamos um circuito de "lock" que está sendo implementado no nosso sistema.

(PADCT)

## PROJETO DE UM SISTEMA DE IMAGENS PARA ÁTOMOS APRISIONADOS

*R. Habesch, V. Bagnato*  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-chave:* Armadilha atômica, instrumentação óptica, imagens.

Os avanços mais recentes na produção de gases no regime quântico [1] estão sendo alcançados através da observação da distribuição espacial de átomos aprisionados. As recentes observações da Condensação de Bose-Einstein [1,2] obtêm conclusões desta transição de fase através do aumento da localização espacial dos átomos. Nos experimentos já realizados o sistema de imagem tem sido um fator limitante. Em vista deste fato, estamos desenvolvendo um projeto com o objetivo de produzir um sistema de imagens com alta resolução e flexibilidade para a observação de átomos em armadilhas.

Desejamos inicialmente projetar e construir um sistema para observação de uma armadilha de átomos de Sódio, com uma resolução da ordem de microns trabalhando em um comprimento de onda de 589 nm, o que exige abertura numérica acima de 0,3. A primeira superfície óptica deve guardar uma distância superior a 2 cm da armadilha, que está no interior de uma câmara de vácuo, o que introduz uma janela óptica na montagem. Tal janela pode gerar aberrações (principalmente aberração esférica) que devem ser minimizadas no projeto do instrumento. Estudamos os efeitos da janela na qualidade da imagem, comparando modelos de janela plana com janelas com superfícies curvas projetadas para minimizar as aberrações. Também estudamos a possibilidade de instalar um primeiro estágio da objetiva antes da janela, cuja função consiste em produzir uma imagem distante o suficiente para que as aberrações introduzidas pela janela sejam desprezíveis. Concluímos que uma janela cujas superfícies são concêntricas ao objeto é mais conveniente como primeiro elemento por apresentar pouca aberração e boa tolerância à variação da posição do objeto, dando maior liberdade ao projeto da objetiva.

[1] M.N.Anderson et al Science 269, 198 (1995).

[2] K. Daviss et al Phys Rev. Lett 75, 3969 (1995)

## Resfriamento e Armazenamento de Espécies Atômicas e Moleculares com Gas Buffer

*Claudio Cesar*  
ETFCE

*Palavras-Chave:* metrologia, armadilha de átomos, condensação de Bose-Einstein

O uso de amostras gasosas frias e em armadilhas tem revolucionado a física atômica e a metrologia<sup>1</sup>. Infelizmente a maioria das espécies atômicas e moleculares não tem linhas espectrais apropriadas para resfriamento a laser e a técnica desenvolvida para hidrogênio não é facilmente generalizada. Nós apresentamos uma proposta baseada na idéia de John Doyle e colegas<sup>2</sup> que propõe o uso de gas buffer para resfriamento e aprisionamento de um número enorme de espécies atômicas e moleculares que tenham um momento de dipolo magnético da ordem de 1 magneton de Bohr. Nossa proposta utiliza uma célula a temperatura de 0.8K obtida por bombeamento de He acoplada a uma bomba de adsorção de He em carvão ativado que permite a variação da pressão de He. No momento de carregar a armadilha magnética, eleva-se a pressão de He na célula de forma que o vapor gerado da espécie em questão termalize com o vapor de He antes de chegar às paredes da célula, ou seja, o caminho médio entre colisões é bem menor que as dimensões da célula. Após a carga da armadilha a pressão de vapor do gas buffer pode ser diminuída por ordens de grandeza desacoplando a temperatura do gas armazenado da temperatura da célula e evitando perda por colisão com o gas buffer. Um armadilha magnética supercondutora com campo máximo de 4T deve permitir a obtenção de densidades iniciais altas o suficiente para permitir o subsequente resfriamento por evaporação. Esta técnica é bastante geral e terá grande impacto em física atômica, molecular e ótica, em físico/química e em metrologia.

<sup>1</sup>ver por exemplo o número dedicado a resfriamento e aprisionamento de átomos do JOSA B 6 (1989); a escola de Fermi em "Laser Manipulation of Atoms and Ions: Varenna on Lake Como", E.Arimondo, W.D.Phillips and F.Strumia, eds. (North Holland, Amsterdam, 1992); e o "Fifth Symposium on Frequency Standards and Metrology", Woods Hole, October 1995, in print (em especial a participação de C.Cesar, et al. e D.Wineland, et al.).

<sup>2</sup>J.M.Doyle, et al. PRA 52, R2515 (1995)

## MODEL MOLECULES FOR PMMA STUDIED BY MULTICOINCIDENCE SPECTROSCOPY

*Alexandre Naves de Brito, Arnaldo Naves de Brito*  
Department of physics, Brasilia University

*Joselito Barbosa Maciel, Gerardo Gerson Bezerra de Souza*  
Department of Chemistry, University of Rio de Janeiro

Palavras-chaves: multiconincidência, sincrotron, foto-excitação

Experiments using sophisticated multicoincidence techniques were performed at the Brazilian Toroidal Grating Monochromator (TGM) beamline at the Center for Advanced Microstructures and Devices (CAMD) at Louisiana State University, USA. This experiments were a joint effort between two Brazilian groups at Rio de Janeiro university and Brasilia university. Photoelectron photoion coincidence (PEPIPICO) measurements on methyl iso-butírate, and methyl acetate was performed at the C1s edge. The fragmentation pattern was found to vary considerably as the photon energy was change from bellow edge to the first  $\pi^*$  resonance. The studied also extend to include excitation to different  $\sigma^*$  resonances and above single ionization threshold. The strongest changes were in the ionic hydrogen production as compared to the other fragments production as we swept the photon energy from bellow resonance to above. Detail on the fragmentation kinetics will be presented based on the PEPIPICO spectra.

These studies on the two molecules have interesting practical application. An example is a better understand and improvement in the construction of micro devices based on the polymer Polymethyl methacrilate (PMMA). Very little use of the tunability of the synchrotron light has been made. Also a lot has to be learned from the etching process involves in photo-micro-fabrication. The present studies on the related molecules may give important clues for the micro-fabrication process that otherwise is difficult to be using the polymer due to sample charging effects, contamination problems, etc.

(CNPq, LNLS)

## ESPECTROMETRIA DE MASSA DE ÍONS DESSORVIDOS POR LASER

*F.E. Ávalos Cascante\*, Cássia Ribeiro Ponciano, Roberto Rosas Pinho, João A. Mesquita Pereira*  
*Joaquim Jeronymo de Moura Filho e Enio Frota da Silveira*  
Departamento de Física, Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

Palavras-Chave: dessorção, MALDI, tempo-de-vôo

LIMS (Laser Induced Mass Spectrometry) e LAMMA (Laser Microprobe Mass Analysis) são técnicas usadas há décadas na análise de superfícies de amostras sólidas. Mais recentemente, melhoramentos nas técnicas de espectrometria de massa e sobretudo na preparação das amostras estenderam a faixa de massa analisadas para além de um milhão de daltons. Este método é conhecido por MALDI (Matrix Assisted Laser Desorption).

Um protótipo de espectrômetro LIMS/MALDI foi por nós construído. Ele utiliza um laser pulsado de  $N_2$  (337 nm e 250 mJ/pulso), um tubo de tempo-de-vôo de 56 cm, tensões aceleradoras de 15 kV e um cronômetro digital tipo TDC multi-stop. Espectros de massa de Csl mostram uma série de picos correspondente à agregados  $(Csl)_nCs^+$ , cujo rendimento de omissão relativo varia com a atenuação aplicada no feixe laser incidente. O rendimento de emissão de macromoléculas é analisado em função do solvente sólido no qual a amostra é dispersa. O mecanismo de transporte de energia do laser às partículas ejetadas é discutido.

\* Doutorado sanduiche com a EPN, Quito, Equador e bolsista do IPS, Upsalla, Suécia.

(PADCT, CNPq e MCT)

## Estudo Teórico sobre Aceleração de um Feixe Atômico - Possíveis Aplicações em Colisões Ultra Frias

*A.L.de Oliveira<sup>\*</sup>, L.G.Marcassa<sup>#</sup> e V.S.Bagnato<sup>#</sup>.*

<sup>\*</sup>Departamento de Física da Universidade do Estado de Santa Catarina.

<sup>#</sup>Instituto de Física de São Carlos/USP.

*Palavras-Chave:* aceleração, feixe atômico, colisões.

O campo de colisões ultra frias na presença de fótons tem passado por grande desenvolvimento nos últimos anos. Isto foi possível graças a utilização de armadilhas magneto-ópticas(MOT) que proporcionam amostras com altas densidades e baixas temperaturas ( $n=10^{10}$  átomos/cm<sup>3</sup> e  $T=200$  microkelvin). Apesar de ser responsável por tal progresso o MOT apresenta algumas desvantagens: i) as colisões são isotrópicas no espaço, ii) não é possível variar a temperatura final da amostra. Sendo as colisões isotrópicas, não é esperado que estas dependam da polarização da luz. Contudo recentemente foi demonstrado em um MOT que o efeito de supressão óptica depende da polarização. Se desejarmos entender melhor os efeitos da polarização em colisões é necessário usarmos um sistema mais simples. O sistema ideal para isto seria um feixe atômico, o qual apresenta uma direção preferencial para colisões. O problema em realizar tais experimentos em feixes é que em geral feixes térmicos apresentam baixas densidades ( $10^9$  átomos/cm<sup>3</sup>) e um número muito pequeno de átomos dentro de uma classe de velocidade  $v$ . Ambos fatores limitam o sinal observado. Isto poderia ser resolvido desacelerando os átomos rápidos até uma velocidade  $v$  e acelerando os lentos até  $v$ . Isto poderia ser realizado utilizando-se a técnica de ajuste Zeeman. Nesta técnica a luz transfere momentum para o átomo que é mantido em ressonância pela compensação do efeito Doppler pelo Efeito Zeeman. Neste trabalho apresentamos um estudo teórico para determinar o perfil espacial do campo magnético necessário para aceleração e quais as condições necessárias para que o átomo siga adiabaticamente o campo.

(CNPq, e UDESC)

## OPTICAL BOTTLE FOR NEUTRAL ATOMS

*E. G. Lima, P. C. Segundo, O. Di Lorenzo, M. Chevrollier and M. Oriá*

Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba

**Key Words:** Dipole optical force, cold atoms

The usual laser techniques for trapping neutral atoms are in presence of light and/or occupying a small volume of a few cubic millimeters. If the radiation fields were removed in a short time the cold sample would reach the cell temperature essentially due to collisions with the walls. One way to maintain an atomic sample at low temperature would be to reflect the atoms by evanescent waves[1] on all internal cell walls (optical bottle). An advantage of this scheme would be a sample with large size ( $\sim 1$  cm<sup>3</sup>), moderate densities ( $\sim 10^8$  atoms/cm<sup>3</sup>) and with only a very small fraction of atoms ( $\sim 0.03$  %) interacting with radiation fields. A three dimensional computer Monte-Carlo simulation was performed within the semiclassical framework. The temporal behavior of a sample of cold atoms in the bottle was investigated for different parameters. The initial conditions for the atoms were obtained from a previous simulation of a magneto-optical trap placed close to the cell bottom wall. The atoms only interact with the radiation field when they are close to the wall, at a distance of the order of the radiation wavelength. Large detunings compared to the transition linewidth, while decreasing the number of transitions to the upper state (a desirable feature since for this state the dipole force becomes attractive) also increase the dipole force strength. Due to their small contributions tunneling effects, and van der Waals interaction of the atoms with the surface were neglected [2]. For realistic conditions it is obtained the dependence of the bottled sample lifetime with the detuning. The atomic parameters were those of cesium. The lifetime of the cold atoms in the optical bottle is of the order of a second. Such large lifetime becomes of the same order of magnitude as the collision time between cold atoms and background vapor. An experiment is being set up using a specially designed cell that will allow evanescent waves on all its internal walls.

1- R. J. Cook and R. K. Hill, *Opt. Commun.* **43**, 258 (1982).

2- W. Seifert, R. Kaiser, A. Aspect and J. Mlynek, *Opt. Commun.* **111**, 566 (1994).

## Colimação e Estruturas Criadas por Pressão de Radiação num Feixe Atômico de Sódio

M. V. Alves, S. C. Zílio, S. Miranda, J. Flemming, V. S. Bagnato

Instituto de Física de São Carlos - IFSC  
Universidade de São Paulo

*Palavras-chave* : Feixes atômicos, pressão de radiação, estruturas espaciais

Feixes atômicos desacelerados têm sido objeto de grande interesse para os mais diversos fins na área de Física Atômica. Os feixes atômicos térmicos convencionais desacelerados pela técnica de ajuste Zeeman apresentam uma divergência espacial no plano transversal à direção de movimento, o que diminui sua densidade. Feixes de maior densidade seriam de grande utilidade em diversos experimentos, tais como aprisionamento de átomos. Apresentamos neste trabalho resultados preliminares de experimentos de colimação de um feixe atômico térmico de sódio e os planos futuros para trabalhos com um feixe desacelerado. O feixe atômico passa através de quatro feixes laser perpendiculares entre si dois a dois, de polarizações circulares opostas, no plano transversal à direção de propagação do feixe e através de dois tipos de forças de pressão de radiação é colimado. Com o desalinhamento dos feixes criamos estruturas espaciais neste feixe, numa versão bidimensional da armadilha magneto-óptica (MOT). Mostramos perfis do feixe antes e depois da compressão, assim como uma das estruturas bidimensionais criadas e seu perfil de distribuição espacial. Os resultados obtidos abrem novas possibilidades nas áreas de Física Atômica e em particular, de nanolitografia atômica.

### Referências :

- [1] - Bagnato, V. S. et al - Phys. Rev. A **48**, 3771 (1993).
- [2] - Guedes, I. Et al - J. Opt. Soc. Am. - B **11**, 1935 (1994).
- [3] - Nellessen, J., Werner, J. and Ertmer, W. - Opt. Comm. **78** ns. 3, 4, 300 (1990).

(FAPESP, CNPq)

## The influence of laser fluctuations and spontaneous emission on the ring shaped atomic distribution in a MOT

*F. Dias Nunes, J. F. da Silva, S. C. Zílio and V. S. Bagnato*  
Instituto de Física de São Carlos - USP

*Palavras-Chave*: MOT, Fluctuation, Spontaneous emission

The spatial distribution of atoms in a magneto-optic trap (MOT) can have different shapes, depending on external parameters such as the laser intensity, detuning, misalignment and magnetic field gradient. Structures such as ball, ring and ring with core can be generated when the laser beams are arranged to form a race-track configuration [1,2]. A theoretical interpretation for such structures was recently reported [2] based on the vortex force model which arises due to the misaligned Gaussian laser beams, but the a model was not complete since it could not explain the existence of a finite width in the ring shaped distribution. In this work we present the results of numerical simulations to justify the origin of the width in ring shaped atomic distributions of cold atoms held in a magneto optical trap. We have considered the effects of laser fluctuations (phase and intensity) and the presence of spontaneous emission. The results show that the occurrence of spontaneous emission accounts for the existence of a width in the atomic trajectory while laser fluctuations can only change the average value of the atomic orbit.

- 1- I. Guedes, M. T. de Araujo, D. M. B. P. Milori, G. I. Surdutovich, V. S. Bagnato and S. C. Zílio, J. Opt. Soc. Am. B, **11**, 1935 (1994)
- 2- V. S. Bagnato, L. G. Marcassa, M. Oria, G. I. Surdutovich, R. Vitlina and S. C. Zílio, Phys. Rev. A, **48**, 3771 (1993)

Apoio: RHAÉ, CNPq, FAPESP

## ARMADILHANDO ÁTOMOS DE SÓDIO COM A LINHA D<sub>1</sub> E ESTUDOS COLISIONAIS

*J. Flemming, L. Marcassa, D. Milori, A. Tuboy, S. Muniz,, K. Helmersson\*, S. Zilio, V. Bagnato*

Instituto de Física de São Carlos - USP  
\*NIST - Atomic Physics Division, Gaithsburg, MD, EUA

*Palavras-Chave:* resfriamento via laser, colisões ultrafrias, sódio

Aprisionamos e resfriamos átomos de sódio em uma armadilha magneto-óptica em cela de vapor, utilizando a linha D<sub>1</sub> deste elemento. É a primeira vez que um alcalino é aprisionado nesta linha e um ponto fundamental para a obtenção desta armadilha é a troca da polarização do laser de rebombeio em dois dos quatro esquemas possíveis. Este tipo de aprisionamento permite um estudo mais detalhado de um tipo de colisão ultrafria, qual seja, **colisões por mudança de estrutura hiperfina ( CMEH )**. Isto porque o nível 3P<sub>1/2</sub>, envolvido nesta transição, tem uma estrutura hiperfina mais simples e espaçada que a do nível 3P<sub>3/2</sub>, envolvida na transição D<sub>2</sub>. Medimos a taxa de perda colisional na armadilha com a linha D<sub>1</sub> no regime onde as CMEH são dominantes. A taxa colisional é extraída da curva de decaimento da fluorescência dos átomos aprisionados. Observamos a dependência com a intensidade do laser aprisionador na linha D<sub>1</sub>. Os resultados obtidos são comparados com medidas anteriores na linha D<sub>2</sub>. Realizamos também uma blindagem das CMEH utilizando um terceiro laser supressor, sintonizado para o azul da ressonância atômica.

Os autores agradecem à FAPESP, ao CNPq e à FINEP. K. H. agradece o apoio do National Institute of Standards and Technology.

## TIME EVOLUTION OF Q-FUNCTION FOR ATOM IN A q-ANALOGUE H.O. TRAP

*Santosh Shelly Sharma*

Depto. de Física, Univ. Estadual de Londrina, Londrina, Pr

*Palavras-Chaves:* q-analog H.O. trap, Two-level atom, Q-function

The time evolution of center of mass motion of a two-level atom, interacting with monochromatic light field in a q-analogue H. O. trap, is examined. Starting with atomic center of mass in a coherent q-analogue Glauber state, the Q-function(Quasi-probability distribution function) shows as many as seven peaks during the collapse period of the population inversion.

The onset of revival is marked by merging together of all the peaks into a single peak. For different sets of initial conditions in the q-analogue harmonic oscillator trap, the time evolution of Q-function is compared with that for the case of atom in a H. O. trap.

(CNPq)

## CONTROLE DA FREQUÊNCIA DE UM LASER DE DIODO DE ALTA POTÊNCIA UTILIZANDO A TÉCNICA DE INJEÇÃO ÓTICA.

*A.M. Tuboy, D.M.B.P. Milori e V.S. Bagnato*

Dep. de Física e Ciências dos Materiais - Instituto de Física de São Carlos- USP

*Palavras-Chave:* laser de diodo, injeção ótica, estabilização

Neste trabalho demonstramos a redução da largura de linha e estabilização da frequência de um laser de diodo de alta potência (~100mW) (laser escravo) emitindo em 852nm através da técnica de injeção ótica. Nesta técnica, um segundo laser de diodo de baixa potência (~20 mW), chamado de laser "master" é previamente estabilizado utilizando a técnica de reinjeção ótica por grade de difração e uma pequena parte deste feixe é injetado no laser de alta potência para obtenção da redução da largura de linha e estabilização. A cavidade do laser de alta potência é utilizado somente como um amplificador do laser de baixa potência. A estabilização em frequência é conseguida através da injeção de um sinal de correção na cerâmica PZT que controla a grade de difração que está acoplada ao laser "master". A estabilização e a redução da largura de linha foi avaliada através do sinal de um analisador de espectro e de absorções saturadas em células de céscio obtidas com o laser "master" e o laser escravo simultaneamente. A largura de linha e a estabilização do laser escravo foi estimado num valor menor que 1 MHz, sendo este valor comprovado posteriormente com a obtenção de amostras aprisionadas de átomos de céscio numa armadilha magneto-ótica.

(FAPESP, CNPq-RHAE)

## ATOMS IN CARBON NANOTUBES

*H. Chacham, M.S.C. Mazzoni, F. V. Lapér, J. L. A. Alves*

Departamento de Física, ICEX, UFMG, C.P. 702, 30161 Belo Horizonte, Brazil

*Keywords:* nanotubes, Hartree-Fock, electronic structure

We present a theoretical study of atoms entering into carbon nanotubes. We have studied group-IV atoms (C, Si, Ge, Sn, Pb) for which there are experimental results in the literature<sup>1</sup> as well as atoms of another columns, like bismuth. Our calculations were performed within the Hartree-Fock approximation with a double-zeta basis set. We consider single-layer tubes with open ends. The dangling bonds at the tube edges are saturated by hydrogen atoms. The diameter of the tube was varied between 4Å and 8Å. The geometry of the nanotubes were optimized using a semi-empirical method (MNDO). According to our calculations, the interaction between the group-IV atoms and the nanotube is attractive, with a potential barrier at the tube edges. These findings are consistent with experimental results by Ajayan and Iijima<sup>1</sup>. We also calculate relativistic corrections to the total energy by means of extended Hueckel calculations parametrized by Hartree-Fock-Dirac calculations. The inclusion of relativistic corrections tends to make the heavier atoms more strongly bound to the nanotube.

1. P. M. Ajayan and S. Iijima, *Nature* **361**, 333 (1993).

(CNPQ)

## SOBRE A EFICIÊNCIA DAS ARMADILHAS MAGNETO-ÓPTICAS COM FEIXES AUXILIARES

A. D. ARAÚJO e I. GUEDES

Departamento de Física - Universidade Federal do Ceará

*Palavras-chave:* átomos, aprisionamento, armadilhas.

Aumentar o número de átomos aprisionados na armadilha magneto-óptica (AMO) vem sendo um desafio constante a ser superado. Sabemos que no regime de gás ideal o número de átomos aprisionados é dado por  $N \propto v_c^4 w^3$ , ou seja é proporcional a velocidade de captura  $v_c$  e a região de aprisionamento, definida pela cintura dos feixes lasers  $w$ . Assim, para aumentarmos o número de átomos aprisionados na AMO, podemos aumentar  $w$  ou aumentar  $v_c$ . Aumentar  $w$  significa aumentar a região de interação átomo-laser. Entretanto para mantermos o mesmo parâmetro de saturação, devemos aumentar a potência dos campos de radiação. É claro então, que esta técnica tem sua aplicabilidade limitada. Resta-nos tentar aumentar o número de átomos aprisionados na AMO via o aumento da velocidade de captura. Várias técnicas têm sido desenvolvidas para este fim. Entre as quais podemos mencionar: inclusão de frequências laterais nos feixes de aprisionamento e *frequency chirping*. De acordo com resultados já conhecidos nenhuma destas forneceram resultados satisfatórios. Recentemente, através de um outro método demonstrou-se a possibilidade do aumento da velocidade de captura pela modificação da geometria da armadilha magneto-óptica. Esta modificação se dá pela inclusão de outros feixes com valores maiores de dessintonia para o vermelho da transição atômica. Devido ao aumento do deslocamento Doppler, podemos desacelerar e aprisionar átomos bem mais rápidos que na AMO convencional. Assim o propósito deste trabalho é o de entender, usando um modelo teórico bastante simples, o princípio de funcionamento destas novas configurações. Uma vez feito isto, calculamos o número de átomos aprisionados e comparamos a eficiência destas novas configurações com AMO convencional. Verificamos que de forma geral, obtemos um aumento em torno de uma ordem de grandeza no número de átomos aprisionados.

## O ESTUDO DE FOTODISSOCIAÇÃO DE MOLÉCULAS TRIATÔMICAS VIA MÉTODO DO POTENCIAL IMAGINÁRIO NEGATIVO.

*Frederico Vasconcellos Prudente e Joaquim José Soares Neto*

Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas - Universidade de Brasília

**Palavras-Chave:** fotodissociação, método do potencial imaginário negativo, representação da variável discreta

A fotodissociação de moléculas induzida pela absorção de um fóton de energia é assunto de estudo detalhado em dinâmica molecular. Este fenômeno pode ser colocado da seguinte maneira: uma molécula em um estado eletrônico, vibracional e rotacional bem definido e estável interage com um campo eletromagnético. Devido à interação, a molécula vai para um estado eletrônico excitado e se dissocia. O estudo dos possíveis estados dos fragmentos da reação é de fundamental importância para se entender a quebra de ligações, transferência de energia interna na molécula e transições sem radiações. Esses processos têm diversos interesses práticos, como por exemplo a fotodissociação do Ozônio ou o problema da combustão. Estamos interessados em calcular a seção de choque de fotodissociação de moléculas triatômicas. Utilizamos para o referido cálculo o método do potencial imaginário negativo (NIPM) e o método da representação da variável discreta (DVR). O NIPM é caracterizado pela introdução de uma barreira de potencial imaginária negativa na região assintótica da coordenada de dissociação, permitindo o estudo de fenômenos de espalhamento com uma representação finita. Ele também transforma o difícil problema de resolver o operador de Green da teoria de espalhamento em um cálculo da inversa de uma matriz. No método DVR o potencial é diagonal e o operador de energia cinética pode ser calculado analiticamente. Aplicamos estes dois métodos para calcular a seção de choque de fotodissociação do estado fundamental para o primeiro estado excitado da molécula de H<sub>2</sub>O. Obtemos a primeira banda de absorção ( $\lambda \sim 167$  nm). Os resultados obtidos mostram a eficiência do NIPM para o estudo de processos de fotodissociação, permitindo realizar cálculos que são impossíveis de se tratar exatamente.

(Parcialmente financiado pelo CNPq)

## ESTIMATE OF TWO-PHOTON ABSORPTION RATE FOR PARA-HELIUM GAS

*Antonio Rubens Britto de Castro<sup>(1,2)</sup> and Thomas Möller<sup>(3)</sup>,*

<sup>(1)</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - Campinas, SP

<sup>(2)</sup>Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP - Campinas, SP

<sup>(3)</sup>HASYLAB am DESY, Hamburg - Alemanha

**Keywords:** helium, absorption, FEL

The para-helium atom has single and double ionization thresholds at 24.58 eV and 79.005 eV above the ground state. In between the thresholds one finds "double excitations", states where both electrons are excited. While most "double excitations" auto-ionize quickly, some are long-lived. The latter have, so far, been investigated by multi-photon absorption using up-converted laser light. Two-photon absorption experiments in the VUV spectral range could help to map the energies and clarify the relaxation paths of non-auto-ionizing double excitations in para-helium, a subject of interest given the - so far - elusive nature of these states. We have made an estimate of the sums over intermediate states in the usual expression for the two-photon absorption rate  $W$ , from 2nd order perturbation theory, in terms of the experimentally measured value of the third order non linear susceptibility  $\chi^3$  for helium. We compute the effect of polychromatic excitation, and show that the reduction in efficiency is given by the factor  $A/B$ , a ratio of the spectral widths  $A$  of the target state and  $B$  of the exciting synchrotron light beam. We investigated two experimental scenarios. For a typical atomic beam set-up, excited with a state-of-the-art Undulator source, the probability for two-photon absorption is far below the expected noise background. For the VUV Free Electron Lasers currently under construction in DESY (Hamburg, Germany) and SLAC (Stanford, USA), on the contrary, it is many orders of magnitude larger than the estimated detection threshold, both on a "single pulse" and on a "per second" basis. Further work in this area will refine the numerical estimate of the sums over intermediate states, and address specific doubly-excited, non-auto-ionizing, final states.

## Study of Metastable States. Application to the HCO Molecule

Luis Silva da Costa e Joaquim José Soares Neto

e-mail:luis@helium.fis.unb.br; neto@helium.fis.unb.br

Departamento de Física - Universidade de Brasília

*palavras-chave:* metastable states, triatomic molecules, negative imaginary potential method

We utilize two methods, the discrete variable representation (DVR) and the negative imaginary potential method (NIPM). DVR is utilized because in that representation the potential energy matrix is diagonal. The NIPM is characterized by the introduction of a negative imaginary potential barrier in the dissociative coordinate. The Hamiltonian is,  $H' = H - iU(R)$  where  $H$  is the actual Hamiltonian and  $U(R)$  is the absorbing potential which is defined only in the asymptotic region. The procedure leads to a diagonalization of a complex and non-Hermitian matrix,  $H'$ . We obtain resonant states (real eigenvalues), and lifetimes (imaginary eigenvalues) for diatomic and triatomic molecules.

Initially, we investigate a potential studied by Bain *et al.*, this is a one dimensional system which have one shape resonance. We calculate this resonance state and lifetime and obtain results that represent a good approximation to the exact results. So, we study a bidimensional system that consists of the three collinear atoms: A, B and C, where A-B form a diatom which is bound by one harmonic oscillator potential and the atom C interacts with the diatom A-B through the Morse potential. This system present a Feshbach resonance. We calculate this resonances and lifetimes and obtain the resonance wave function.

Finally we develop a code to study three atomic molecule in its full dimensionality. The program will be used to study the metastable states of HCO.

In conclusion, we calculated energies and lifetimes of metastable states of diatomic and triatomic systems. We utilized DVR and NIPM to perform the calculations. The results are in agreement with those obtained by other groups using different procedures.

(CNPq)

## Evolução Temporal de Estados Metaestáveis

Luis Silva da Costa, Tarcsio Marciano da Rocha Filho e Joaquim José Soares Neto

e-mail:luis@helium.fis.unb.br; marciano@helium.fis.unb.br; neto@helium.fis.unb.br

Departamento de Física-UnB

*palavras-chave:* estado metaestável, dinâmica quântica, potencial imaginário

Uma maneira de obtermos estados meta-estáveis consiste em empregarmos o formalismo da função de Green para a Hamiltoniana do problema. É um resultado bem conhecido que os estados que diagonalizam a função de Green correspondem ao estado meta-estável desejado, sendo seu tempo de vida dado pela parte complexa do denominador do autovalor. Neste trabalho calculamos os estados metaestáveis para um potencial bidimensional (Eastes-Marcus) que representa uma colisão colinear de um átomo A com um diátomo B-C, tal cálculo é feito com o método do potencial imaginário (NIPM), além disto estudamos a evolução temporal desse estado utilizando o método de separação de operadores na descrição de interação. A escolha de descrição se baseia no fato que o cálculo de integrais envolvendo a função de onda do sistema se faz com maior precisão na descrição de interação (Araújo Sousa, Soares Neto & Rocha Filho). Um problema encontrado em métodos dependentes do tempo se refere ao problema da condição de contorno quando a função de onda chega nas bordas da malha numérica empregada na integração da equação de Schrödinger dependente do tempo, que causa reflexões artificiais da função de onda. Uma maneira de contornar o problema consiste em empregarmos um potencial ótico. Trata-se de um potencial puramente complexo, que introduz um termo não-hermitiano na Hamiltoniana, que por sua vez causa um amortecimento na função de onda quando esta penetra na região de atuação desse potencial, que deve ser calibrado para o problema em consideração. Calculamos então a função de autocorrelação do sistema, com a qual calculamos a ocupação do estado inicial em função do tempo. Isso nos permite calcular o tempo de vida do estado e compará-lo com resultado análogo obtido a partir do NIPM, mostrando uma boa concordância, permitindo no entanto melhorá-lo pois nosso cálculo mostra um pequeno desvio com decaimento puramente exponencial.

(CNPq)

## VIBRATIONAL SPECTRUM META STABLE STATES AND PHOTODISSOCIATION OF H<sub>2</sub>S

Frederico Vasconcellos Prudente (PG), Luis Silva da Costa (PG), Joaquim Soares Neto (PQ), Alexandre Naves de Brito (PG), André Bueno Machado (IC), Arnaldo Naves de Brito (PQ)

Department of Physics, Brasilia University

*Palavras-Chaves:* h<sub>2</sub>s , ab-initio, cálculo vibracional

Potential energy surfaces were calculated for the ground,  $2p^{-1}{}^6a_1$  and  $2p^{-1}{}^2b_2$  states of the H<sub>2</sub>S molecule. Some points in the surface were calculated using *ab-initio* MCSCF (Multiconfigurational Self Consistent Field) wave function. The number of points in each region was chosen in order to describe accurately the dissociative channels of H<sub>2</sub>S. Three possible dissociative channels are present for the H<sub>2</sub>S molecule: (1) dissociation of only one hydrogen, H+S\*H; (2) dissociation of both hydrogens as independent atoms, H+H+S\*, and; (3) dissociation of both hydrogens forming a hydrogen molecule, H<sub>2</sub> + S\*. The importance of describing these dissociative channels is that upon excitation to the  $2p^{-1}{}^6a_1$  state ultra-fast dissociation was found to occur before the Auger decay. Testing of the goodness of calculated surface is better done by vibrational energy calculations that can be compared directly with experimental results. This calculation can be performed with high precision. Here we calculate the vibrational spectrum of H<sub>2</sub>S using the ground State Surface. The study of possible metastable states belonging to the electronically excited states of H<sub>2</sub>S and photodissociation process for this molecule, we make this with the negative imaginary potential method (NIPM) which is characterized by the introduction of one complex barrier in the dissociative coordinate and Discrete Variable Representation (DVR).

(CNPq)

## TIME DEPENDENT CALCULATION ON THE CORE EXCITED STATE $2p^{-1}{}^6a_1$ H<sub>2</sub>S

Tarcisio M. R. Filho (PQ), Alexandre Naves de Brito (PG), André Bueno Machado (IC), Arnaldo Naves de Brito (PQ)

Department of Physics, Brasilia University

email: marciano@helium.fis.unb.br

*PALAVRAS-CHAVES:* H<sub>2</sub>S , CALCULO AB-INITIO, ANALISE TEMPORAL

H<sub>2</sub>S, has been shown to give rise to faster dissociation than Auger decay upon  $2p^{-1}{}^6a_1$  excitation. Recent experimental data has allowed vibrational levels connected to the resonant Auger decay in the fragment S\*H to be resolved, where \* indicates a core excitation. Furthermore, at some photon energies, hot bands connected to the decay from the vibrationally excited levels,  $v=1$  and  $2$ , in the core excited fragment, are observed. Therefore the major feature observed in the Auger spectra upon this excitation can only be interpreted as the decay in the fragment S\*H. Featureless structure in the Auger spectrum was however interpreted as the Auger decay in the molecules as one of the hydrogen depart from the molecule. Comparison of the relative intensity of each type of decay give information time dependent behavior of the decay and dissociation processes. This information can be compared with theoretical calculation. As far as we know, until the present, only semi-classical calculations was performed to describe the time development of the dissociation and decay processes. Although the semi-classical calculation provide a qualitative understanding of the physical phenomena involved, more rigorous quantitative agreement with the experimental data can only be achieved by using more sophisticated methods based completely on quantum mechanics. In this work we will present a full quantum calculation of the propagation of the state of the H<sub>2</sub>S molecule. We computed the expectation value of the coordinates of the dissociated fragment solving the time-dependent Schrödinger equation using the results to discuss the experimental data.

(CNPq)

## PERFIS AUTO-AFINS EM AUTÔMATOS CELULARES UNIDIMENSIONAIS

*José Antônio de Sales, Marcelo Lobato Martins\* e José Guilherme Moreira*

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

\* Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa

Os autômatos celulares (ACs) unidimensionais de Wolfram são modelos determinísticos, dotados de interações de curto alcance, homogêneos, atualizados em paralelo e triplamente discretos (no tempo, no espaço e nas variáveis dinâmicas). Apesar de sua simplicidade, os ACs podem gerar espontaneamente estruturas complexas e exibir caos espaço-temporal. Em razão de sua localidade as regras de ACs não definem nenhum outro comprimento característico que não seja o raio de sua vizinhança, e nenhuma escala de tempo que não seja a sua ordem temporal. Mas mesmo assim os padrões espaço-temporais gerados pelos ACs podem apresentar efeitos de longo alcance muito complexos, invariantes de escala e similares aos dos fenômenos críticos.

Neste trabalho propomos para caracterizar as quatro classes de Wolfram, além das tradicionais densidades de sítios ou blocos de sítios com valores fixos e das funções de correlação de dois pontos, uma medida estatística global sobre as configurações de ACs. Tal medida se baseia num mapeamento um a um das configurações espaciais ou temporais geradas pela evolução dos ACs em caminhadas unidimensionais. Estabelecida a trajetória dessa caminhada, a natureza de suas correlações é investigada através da análise de sua rugosidade determinada pelo expoente de Hurst.

Nossos resultados mostram que os ACs de classe II (periódicos no tempo) possuem configurações espaciais caracterizadas por expoentes de Hurst entre 0 e 0.35. Já as regras caóticas de classe III possuem expoente de Hurst 0.50, o que caracteriza a ausência ou, no máximo, um comprimento de correlação finito. Finalmente as regras de classe IV, que geram estruturas localizadas e persistentes, possuem expoente de Hurst maior do que 0.65 e, portanto, exibem correlações de longo alcance.

## RANDOM SPIN-1 QUANTUM CHAINS

*Beatriz Boechat, Andreia Saguia e Mucio Continentino*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* antiferromagnetic systems, quantum chains, renormalization group

In this Communication we study a one-dimensional, spin-1, Heisenberg system with random exchange and biquadratic interactions. We use an extension of the real space renormalization group approach introduced for spin-1/2 quantum chains [C. Dasgupta and S.K. Ma, *Phys. Rev B* **22**, 1305 (1980)]. We consider the general bilinear, biquadratic, spin-1 chain with  $L$  spins described by the Hamiltonian

$$H = \sum_{r=1}^{L-1} J_r \vec{S}_r \cdot \vec{S}_{r+1} - \sum_{r=1}^{L-1} D_r (\vec{S}_r \cdot \vec{S}_{r+1})^2$$

where  $J_r$  and  $D_r$  are random nearest neighbor interactions with probability distributions  $P_J(J_r)$  and  $P_D(D_r)$  respectively. The  $\vec{S}_r$  are spin-1 operators and we are interested in the limit  $L \rightarrow \infty$ . In the case where the biquadratic is the dominant interaction such that the cutoff  $D \gg J$ , we find a new disordered phase for spin-1 chains which is essentially a random singlet phase. We find that weak disorder destroys the dimerized phase of the ordered system giving rise to low energy and long range correlations. In the Haldane region of the phase diagram ( $J \gg D$ ) of the pure chain our results indicate that starting with distributions which are strongly disordered we obtain a thermodynamic behavior which is similar to the random singlet phase of disordered spin-1/2 system but with weaker singularities in the thermodynamic properties.

(CAPES, CNPq, FAPERJ e FINEP)

## Fractal Pores Distribution in Wood

*José A. Redinz and Paulo R. C. Guimarães*

Departamento de Física - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG

*Palavras-chave* : fractal, wood structure, porosity

Wood is cellular and thus not a solid, but a inhomogeneous porous material. The internal structure of wood presents a diffuse porous distribution of vessels, constituted of numerous axial parenchyma cells, resin canals, tracheids, and secondary walls with pits. Under electron microscope examination, this structure is very similar to a irregular combination of different Sierpinski sponges. In the present work we study the fractal pores distribution in different species of wood. We measure, by pressurized water absorption, the internal volume of the vessel distribution in wood. We show that each pressure selects a different fractal porous subset, which has its fractal dimension obtained by the scaling of the internal volume with the side length of cubic blocks of wood. Different species have different sets of fractal dimensions, reflecting the variety of internal structures present in wood. Our results show that, for example, at the ambient pressure, the wood of the studied species can be characterized by a fractal dimension in the range 2.46 to 2.84. A precise estimative of the fractal dimensions of wood should be very important in its physical characterization, constituting a new parameter of classification. The knowledge of the wood structure is of multiple importance, explaining the behavior of wood as a material, for practical interests, and, helping the understanding of the tree growth process, a subject of biological interest. In particular, in what concerns the practical use of wood, the physical properties of interest, as the permeability, the dielectric constant, the electrical resistance, the specific gravity, the thermal conductivity, and the mechanical resistance, have a direct relation to porosity. Although the relation between the porosity and the fractal dimensions here obtained is not clear until now, the fact that the former is a fundamental physical parameter in the technological applications of wood suggests, for these dimensions, a future application as a wood discriminant parameter.

## CÁLCULO DIRETO DA PRESSÃO EM SISTEMAS DE GÁS DE REDE POR MONTE CARLO

*Ricardo Andreas Sauerwein*

Centro de Ciências Naturais e Exatas, Universidade Federal de Santa Maria

*Mário José de Oliveira*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave*: gás de rede, pressão, monte carlo

O método recentemente apresentado para o cálculo direto da entropia ou da energia livre em sistemas de spin através de simulações de Monte Carlo é aplicado ao problema análogo da determinação direta da pressão em sistemas de gás de rede. Cálculos de Monte Carlo usuais destes sistemas necessitam de várias simulações para a determinação da pressão através da integração de alguma equação de estado sobre um caminho do diagrama de fases a partir de um ponto de pressão conhecida. Nosso algoritmo, capaz de estimar o maior autovalor da matriz de transferência, avalia a pressão diretamente em cada ponto do diagrama de fases, ou seja, com temperatura  $T$  e potencial químico  $\mu$  constantes, evitando assim simulações fora da região de interesse e o acúmulo de desvios inerentes ao processo de integração termodinâmica. O modelo escolhido para apresentar esta nova aplicação do método direto é o modelo de placas rígidas com interação diagonal atrativa. Este modelo é um gás de rede em uma rede quadrada com interação exclusiva entre sítios primeiros vizinhos e interação atrativa entre sítios segundos vizinhos (diagonais). Calculamos a pressão tanto pelo nosso método direto quanto pelo método de integração termodinâmica em simulações de sistemas de  $L \times K$  sítios com valores de  $L$  até 32 sítios e valores de  $K$  até 200 sítios. A comparação dos resultados obtidos por ambos os métodos mostram que nosso algoritmo é pelo menos tão confiável quanto os algoritmos tradicionais desde que a dimensão  $L$  não seja demasiadamente grande. Neste caso, este algoritmo oferece uma alternativa de fácil implementação para o cálculo rápido e direto da pressão em sistemas de gás de rede.

## NUMERICAL SIMULATIONS IN MAGNETIC SYSTEMS : OPTIMIZATION BY PARALLEL PROCESSING AND TSALLIS STATISTICS

*M. P. de Albuquerque, R.Moutinho, N.Alves and L.C.Sampaio*

*Centro Brasileiro de Pesquisas Fisicas - CBPF/CNPq  
Rua Dr. Xavier Sigaud, n.150 URCA - CEP. 22290-180 - Rio de Janeiro, RJ, Brazil*

**Key-words:** magnetic patterns, parallel procesing, relaxation.

Recent interest in parallel processing applied to different problems has motivated us to investigate the use of parallel tools in order to follow the evolution of magnetic domain patterns in thin films. We have simulated the magnetic relaxation and the formation of magnetic domains using Monte-Carlo methods (single-spin-flip and Metropolis dynamics) based on a two-dimensional classical Ising model on a square lattice, including the long range dipole-dipole interactions summed to all pairs. The main problem involved with long range interaction is the prohibitive computational time, that increases quickly with lattice size and whit a large number of Monte-Carlo steps. We developed an Monte-Carlo algorithm to a multicomputer system IBM-SP2 in LNCC, that use a large local memory for each processor and a communication network for processor interaction via message-passing. We use three distinct interfaces: the classical Parallel Virtual Machine method, the Parallel Environment and the Message Passing Interface. In the first method we attained a factor of 4 in speed time, and in both last we attained a factor of 10. In this simulation we have a communication overhead imposed by the interaction between process, and we were able to calculate the optimal number of processors based on the partition (process granularity) of the magnetic system. The relaxation algorithm generates a sequence of magnetic patterns linked through an hypertext file compatible with normal Internet Browsers.

A more efficient procedure when looking for the magnetic pattern associated with the ground state can be obtained with a more specific optimization. Instead of using the traditional probabilities defined in Metropolis dynamics, in this work we use also the acceptance probabilities defined in the generalized simulated annealing (using Tsallis statistics). Both methods are implemented and compared in parallel environment machines.

## SIMULAÇÕES DE TORNEIRAS GRANDES GOTEJANTES

*A.R. de Lima, T.J.P.Penna, P.M.C. de Oliveira*  
Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense - RJ  
*J.C. Sartorelli, W.M. Gonçalves e R.D. Pinto*  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo - SP

**Palavras-Chave:** simulações computacionais, caos, criticalidade

Um dos sistemas dinâmicos mais simples que apresenta comportamento complexo em suas séries temporais é a torneira gotejante. Este comportamento tem sido comprovado por diversas experiências, iniciadas por R. Shaw e seu grupo, *Phys.Lett. A110*, 339 (1985) e simulações computacionais (de Oliveira e Penna, *J.Stat.Phys.* 73, 789, 1993). Recentemente (Penna *et. al.*, *Phys.Rev.E* 52, R2168, 1995) foi sugerida a existência de correlações de longo alcance em séries temporais dos intervalos entre gotas sucessivas. Tal resultado foi obtido através da análise de quatorze séries experimentais e quarenta séries obtidas de simulações computacionais do modelo para gotas bi-dimensionais. Para todas as séries estudadas, as flutuações permaneciam constantes independente do alcance. Este fato indica que as correlações decaem como leis de potência, sugerindo que a torneira gotejante funcione em um regime crítico, contrariando a crença, desde o trabalho pioneiro de Shaw, que este sistema fosse caótico. Neste trabalho, apresentaremos resultados de simulações computacionais de torneiras grandes (maiores que 32 parâmetros de rede). É fato conhecido (Dreyer e Hickey, *Am.J.Phys.* 59, 619, 1991) que torneiras grandes apresentam comportamento diferente de torneiras menores (da ordem de décimos de milímetro de raio). Apresentaremos as alterações no código original que o tornaram ainda mais eficiente. Com estas modificações fomos capazes de produzir séries longas o suficiente para o estudo da capacidade de previsões de séries temporais, com a finalidade de estudar a performance dos métodos tradicionais de previsões de séries caóticas quando aplicados a situações marginais, como séries críticas. Adicionalmente, mostraremos os resultados de simulações do modelo bi-dimensional, para os aspectos dinâmicos e a forma das gotas, apresentando excelente concordância com os dados experimentais como, por exemplo, o comportamento linear do centro de massa da gota até a definição do pescoço.

## ANISOTROPIC RANDOM SPIN-1 QUANTUM CHAINS

*Andreia Saguia, Beatriz Boechat e Mucio Continentino*

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense - RJ

*Palavras-Chave:* antiferromagnetic systems, quantum chains, renormalization group

Although much progress has been made on the understanding of the physical properties of ordered isotropic quantum spin chains much less has been achieved in the random case in particular for anisotropic spin-1 chains. For the random exchange isotropic Heisenberg antiferromagnetic spin-1 chain theoretical advance has been motivated by experimental results on one-dimensional magnetic materials known as warwickites [M. Continentino et al., to be published in *Phil. Mag.*]. In this work we use a real space renormalization group approach which has proved to be very successful for spin-1/2 quantum chains [C. Dasgupta and S.K. Ma, *Phys. Rev B* **22**, 1305 (1980)] to study the one-dimensional, spin-1, Heisenberg system with local anisotropy. The general Hamiltonian model describing a chain with  $L$  spins is

$$H = \sum_{r=1}^{L-1} J_r \vec{S}_r \cdot \vec{S}_{r+1} + \sum_{r=1}^{L-1} A_r S_r^z S_{r+1}^z + \sum_{r=1}^L G_r (S_r^z)^2$$

where  $J_r$  are random nearest neighbor antiferromagnetic interactions with probability distributions  $P_J(J_r)$ ,  $A_r$  are the anisotropy factor and  $G_r$  are the local anisotropy on each site  $r$  which can be made positive or negative. We have obtained the recursion relations for the Hamiltonian parameters which allow us to find the phase diagram and the thermodynamic properties of the system.

(CAPES, CNPq, FAPERJ e FINEP)

## O MODELO SHERRINGTON-KIRKPATRICK NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO BIMODAL

*E. Nogueira Jr., F.D. Nobre, F.A. da Costa e S.G. Coutinho\**

Departamento de Física - UFRN

Departamento de Física - UFPE

*Palavras-Chave:* Sistemas Desordenados, Vidros de Spins, Campo Aleatório

Vidros de spins e ferromagnetos em campos magnéticos aleatórios se destacam dentre os problemas mais estudados na Mecânica Estatística dos sistemas desordenados. Neste trabalho consideramos uma união destes dois sistemas, ou seja, estudamos o modelo Sherrington-Kirkpatrick (vidro de spins de Ising com interações de alcance infinito, obedecendo uma distribuição de probabilidades Gaussiana com média  $J_0/N$  e largura  $J/\sqrt{N}$ ) na presença de um campo magnético aleatório bimodal ( $P(h_i) = p\delta(h_i - h_0) + (1-p)\delta(h_i + h_0)$ ). O problema é estudado através do método das réplicas e uma abordagem inicial é feita na aproximação de simetria entre réplicas. Dois parâmetros de ordem são necessários para a descrição do sistema, a magnetização  $m$  e o parâmetro de vidro de spins  $q$ . Devido à presença do campo aleatório o parâmetro  $q$  é sempre induzido, não havendo portanto transição de fase associada ao mesmo. Para  $p \neq 1/2$  a magnetização também é induzida, tornando o problema trivial. Entretanto, o caso  $p = 1/2$  apresenta uma transição de fase associada ao parâmetro  $m$ , produzindo uma fronteira crítica no plano  $T/J$  versus  $J_0/J$  separando as fases Ferromagnética ( $m \neq 0$ ;  $q \neq 0$ ) e Independente ( $m = 0$ ;  $q \neq 0$ ). Determinamos esta fronteira para diferentes valores de  $h_0/J$  e verificamos uma transição contínua para  $h_0/J < 0.95$ . Entretanto para  $h_0/J$  ligeiramente acima do valor 0.95, encontramos a presença de um ponto tricrítico, a uma dada temperatura  $T^*(h_0/J)$ , abaixo da qual a fronteira crítica é caracterizada por uma transição de primeira ordem. A análise de estabilidade da solução de simetria entre réplicas nos permite dividir as fases descritas acima em duas partes cada: uma onde a solução com simetria entre réplicas é estável e outra, a baixas temperaturas, onde tal solução é instável.

## CRESCIMENTO SOBRE SUBSTRATOS RUGOSOS

*Tales José da Silva e José Guilherme Moreira*  
Departamento de Física - ICEx - UFMG

*Palavras Chave:* rugosidade, auto-afinidade, crescimento

Modelos de crescimentos de interfaces rugosas têm sido recentemente propostos com o objetivo de se entender diversas formas de superfícies existentes na natureza. Crescimento epitaxial, colônias de bactérias, pilhas de areia etc. são alguns exemplos onde se pode encaixar as diversas dinâmicas existentes. Algoritmos computacionais e cálculos teóricos tentam mostrar o comportamento de algumas grandezas macroscópicas. O perfil de crescimento, após algum tempo de deposição se apresentará rugoso, sendo a rugosidade (dispersão) a grandeza relevante. Em modelos onde as alturas estão correlacionadas, a rugosidade  $\omega$ , para tempos curtos, se comportará como  $\omega \sim t^\beta$  e, para tempos longos, temos  $\omega \sim L^H$ . Dentre os vários modelos, estudamos os modelos Edwards-Wilkinson e Kim-Kosterlitz que não permitem que a diferença de altura entre sítios vizinhos ultrapasse um certo valor  $m$ . Se o sítio sorteado com o acréscimo de uma partícula tiver uma diferença de altura com seus vizinhos maior que  $m$ , a partícula difundirá (modelo EW) ou o sorteio será recusado (modelo KK). O fato da partícula difundir ou do sorteio ser recusado altera o expoente dinâmico. Estamos particularmente interessados no crescimento que se dá a partir de um substrato previamente rugoso. Simulações computacionais indicam que o crescimento da rugosidade com o tempo se dá com um expoente  $\beta_r$  maior que  $\beta$ .

(CNPq)

## QUANTUM IDEAL GASES WITHIN NON-EXTENSIVE THERMOSTATISTICS

*Sergio Curilef*  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro

*Palavras-Chave:* Ideal Gas, Non-extensive System, Generalized Statistics.

The Boltzmann-Gibbs statistics and its connection with thermodynamics are powerful tools in theoretical physics to study situations where the following conditions are satisfied (i) the effective microscopic interaction is short-ranged or inexistent, (ii) the microscopic memory is short-ranged or inexistent and (iii) the system evolves in a nonfractal space-time. This is to say, whenever the extensive (additive) properties of thermodynamics hold. However, the explicit need for a nonextensive thermodynamics has been well known in cosmology, gravitation and astrophysics, magnetic systems, Lévy-like anomalous diffusion, etc. As a possible solution, Tsallis proposed a nonextensive entropy. This formalism has already received some applications. Among them, let us mention: Self-gravitating systems, Stellar polytropes, Vlasov equation, Lévy-like anomalous diffusion; Simulated annealing. Furthermore, its connection within quantum statistics, quantum groups, fractals, etc., has been established.

Now, within this formalism, we study the quantum ideal gas (no interactions in the Hamiltonian) in a (non Euclidean) fractal space. The last fact makes necessary to use a nonstandard Boltzmann-Gibbs statistics. The Tsallis formalism will be used, where the information about the fractal dimension is kept in a parameter  $q$ .

The standard results are recovered from the generalized results when  $q=1$ , as it should be. It is shown that, the critical temperature for the phase transition of the Bose-Einstein condensation is modified whenever the nonextensive thermostatics is considered. In particular, all these theoretical approaches provide a critical temperature which increases with  $q$ . The chemical potential is depicted as a function of the temperature for the Bose and Fermi gas.

(CLAF/CNPq)

## CRITICALIDADE NO MODELO DE FOGO DE FLORESTA

*Marcelo Henrique de Araújo Santos Costa,  
Adriano de Oliveira Sousa,  
Antonio Fernandes Siqueira*

Departamento de Física - Universidade Federal do Ceará

*Palavras-chave:* fogo de floresta, criticalidade, expoentes críticos

Consideramos um modelo de fogo de floresta em uma rede bidimensional  $100 \times 100$  com uma fração de ocupação  $f_{oc}$ . Do total das árvores, uma fração  $f_r$  é de árvores ressequidas, enquanto que o restante,  $f_v$ , é de árvores verdes. As árvores são colocadas em posições aleatórias da rede. A floresta conta ainda com  $I$  incendiários, dispostos aleatoriamente, e  $G$  guardas-florestais, colocados em setores. Cada árvore ressequida pode pegar fogo em uma das seguintes situações: um incendiário atea fogo à árvore ou com probabilidade  $f$ , se ela tem pelo menos uma árvore vizinha em chamas. Além disso, a presença de um vento, de intensidade uniforme ao longo de toda a floresta, favorece determinada direção de propagação do fogo. O fogo pode ser contido se pelo menos em um tempo  $t_{min}$  aparecer um guarda-florestal. O papel do guarda-florestal também pode ser de prender o incendiário, se este estiver próximo a dois sítios de distância. Uma árvore verde é imune ao fogo mas, devido à influência da vizinhança ou dos incendiários, pode tornar-se matura, passando então a ter uma probabilidade de incendiar-se, de maneira análoga a uma árvore ressequida. Contudo, no caso do fogo de uma árvore matura ser contido por um guarda-florestal, esta regenera-se em um tempo  $t_r$ . A simulação fornece o número de árvores remanescentes para diferentes valores dos vários parâmetros. Verifica-se que o número de árvores remanescentes apresenta criticalidade auto-organizada.

## MODELO DE ANDERSON DE DOIS CANAIS

*Sandra Cristina Costa, João Vitor B. Ferreira  
Valter Luiz Líbero e Luiz Nunes de Oliveira*  
Instituto de Física de São Carlos - USP, São Carlos - SP

*Palavras-chave:* Grupo de Renormalização Numérico, modelo de Anderson, dois canais

Os modelos de Kondo e Anderson para ligas magnéticas diluídas estão entre os mais importantes e estudados na atual Física do Estado Sólido. A versão original desses modelos considera as impurezas desprovidas de graus de liberdade orbital, isto é, apenas spin é levado em conta. No sentido de superar essa limitação, Nozières e Blandin<sup>1</sup> introduziram os chamados modelos multicanais e com argumentos de *scaling* mostraram o aparecimento de um novo ponto fixo estável, distinto dos pontos fixos tipo líquido de Fermi até então conhecidos para o modelo de Kondo ou Anderson. Invariância Conforme<sup>2</sup>, Bethe ansatz<sup>3</sup> e mesmo Grupo de Renormalização Numérico (GRN)<sup>4</sup> têm revelado importantes propriedades desses modelos multicanais, contudo, sempre limitado ou baixas temperaturas ou a propriedades termodinâmicas. O estágio atual alcançado pelo GRN permite que se explore esses modelos, em particular o de dois canais, em todo seu espaço de parâmetros e em todas as temperaturas, que incluindo todos os pontos fixos e regiões de crossovers. Pretendemos implementar esse estudo calculando, propriedades termodinâmicas como suscetibilidade magnética e calor específico, e dinâmicas, como densidade espectral.

<sup>1</sup> P. Nozières, A. Blandin, J. Phys. (Paris) **41**, 193 (1980).

<sup>2</sup> I. Affleck, A. W. W. Ludwig, Nucl. Phys. B **352**, 849 (1991).

<sup>3</sup> Natan Andrei, Andrés Jerez, Phys. Rev. Lett. **74**, 4507 (1995).

<sup>4</sup> H. B. Pang, D. L. Cox, Phys. Rev. B **44**, 9454 (1991).

(CNPq, CAPES)

## Brownian motion in a two-dimensional periodic potential

L. Y. Chen,<sup>1</sup> M. R. Balcan,<sup>2</sup> and S. C. Ying<sup>3</sup>

<sup>1</sup> University of Texas at San Antonio, San Antonio, Texas 78249

<sup>2</sup>Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, SP

<sup>2</sup>Universidade São Francisco Itatiba, São Paulo

<sup>3</sup>Brown University, Providence, Rhode Island 02912

key-word Modelcar Dynamics, Brownian Motion

We present a Molecular Dynamics (MD) study of a Brownian particle in a two-dimensional periodic potential. For a separable potential, the study of the diffusion constant along the symmetry directions reduces to two one-dimensional problems. In this case, our MD study agrees with the existing analytical results on the temperature and the friction ( $\eta$ ) dependence of the diffusion constant ( $D$ ). For a non-separable and anisotropic potential such as the adsorption potential on a bcc(110) surface, the present study predicts a new  $D \sim 1/\eta^{0.5}$  dependence in the low friction regime as opposed to the  $D \sim 1/\eta$  dependence found in previous studies of one-dimensional or separable potentials. We find that the dependence of  $D$  on  $\eta$  in the low friction regime is directly related to the occurrence of long jumps. The probability for the long jumps depends not only sensitively on the value of the friction but also on the geometry of the surface. On the bcc(110) surface, the path connecting adjoining adsorption sites does not coincide with the direction of easy crossing at the saddle point. Consequently, the probability of deactivation is enhanced, leading to the reduction of long jumps and the new dependence of  $D$  on  $\eta$ .

## FILTERING OF GEOPHYSICAL MODELS VIA MAXIMUM ENTROPY

*Amin Bassrei*

Instituto de Física/UFBA and PPPG/UFBA

*Palavras-Chave:* maximum entropy, image restoration, geophysical tomography

In this work we apply a Maximum Entropy (ME) approach in the filtering of geophysical data. This formulation is based on a probabilistic philosophy and on the concept of entropy. It is defined an objective function which contains the entropy of the model parameters  $\mathbf{m}$ . The objective function is then minimized under adequate constraints in order to give the output estimate of the model parameters  $\mathbf{m}^{est}$ , where the effect of noise is minimized. The model parameters can be for instance, the velocity  $\mathbf{v}$  (or slowness  $\mathbf{s}$ ) in seismic tomography or the density  $\rho$  in gravity inversion. The concept of entropy was adopted from statistical mechanics when the Information Theory (IT) was founded by Shannon and Wiener in 1940's. Entropy in the IT sense means average information, related to a process, for example the transmission of a message. The information is defined as the logarithm of the inverse of the probability associated to an event or, to give an illustration, the probability associated to a message among many others transmitted by a source. Jaynes (Physical Review 106, 620-30, 1957), formalized the concept of maximum entropy, which has been applied with success in several fields of science and technology. The role of entropy is in such a way that Jaynes (1957), states that entropy is a primitive physical concept, even more fundamental than the concept of energy. The estimate  $\mathbf{m}^{est}$  is the solution of the minimization problem, and is consistent with the input data. The ME solutions have a reluctance to fluctuate, avoiding as much as possible the small oscillations due to the data corrupted by noise. The tests with synthetic data in seismic tomography and gravity inversion show the promising application of this ME technique in geophysical filtering.

(CNPq)

## INVARIÂNCIA DE ESCALA EM MODELOS UNIDIMENSIONAIS TIPO PILHA DE AREIA

Suani Tavares Rubim de Pinho<sup>1</sup> e Carmen Pimentel Cintra do Prado  
Instituto de Física - Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* criticalidade auto-organizada, invariância de escala, avalanche.

O conceito de criticalidade auto-organizada (SOC) foi introduzido por Bak e colaboradores para descrever o comportamento de sistemas dissipativos estendidos que apresentam invariância de escala (SI) sem ajuste de parâmetros externos. O protótipo destes sistemas foi modelado por autômatos celulares do tipo 'pilha de areia'. Analisamos comparativamente diversos modelos unidimensionais limitados que apresentam SI, visando mostrar que este comportamento não traduz necessariamente complexidade, podendo ser causado por diferentes mecanismos resultantes da dinâmica das avalanches. Consideramos condições de contorno tais que uma extremidade da rede é aberta e a outra fechada. Fizemos simulações numéricas baseadas na análise das funções distribuição do número de grãos que caem para fora da rede e do número de saltos de grãos entre sítios. Estudamos a versão unidimensional do modelo de Bak, Tang e Wiesenfeld (BTW1), o modelo local - limitado (LL), o modelo não-local e limitado (NLL) e o modelo local, limitado e com 'armadilhas' (sítios onde as avalanches são interrompidas) proibidas (LLL). Por fim, obtivemos as seguintes conclusões:

- A SI com caráter multi-escala e a existência de comprimentos característicos divergentes do modelo LL resultam da presença das armadilhas e das avalanches que se propagam para trás, inexistentes no modelo trivial BTW1.
- A SI do modelo LLL é consequência da inhomogeneidade na forma de perturbar o sistema, resultante da condição de contorno. Tal comportamento não pode ser considerado complexo, em analogia com o modelo BTW1.
- O modelo NLL apresenta SI mas não possui comprimentos característicos na rede finita; tal comportamento resulta da formação de grandes avalanches geradas por diversos ramos, capazes de ultrapassar as 'armadilhas', podendo ser considerado complexo em analogia com os modelos bidimensionais que apresentam SOC.

(†CAPES/PICD - Universidade Federal da Bahia)

## RANDOM ISING CHAIN IN A TRANSVERSE FIELD

A. P. Vieira, Kerson Rocha Jr. and L. L. Gonçalves  
Departamento de Física - UFCE

*Palavras-Chave:* Ising model, transverse field, random systems

The one-dimensional  $s=1/2$  Ising model, closed chain ( $N$  sites), with random coupling constants in a uniform transverse field [1-3] is considered. The random variables are assumed to satisfy the bimodal annealed distribution

$$p(J_j) = p\delta(J_j - J_A) + (1-p)\delta(J_j - J_B).$$

By using the Jordan-Wigner fermionization and a canonical transformation the problem is reduced to computing the eigenvalues and eigenvectors of a  $N \times N$  matrix, corresponding to a problem of  $N$  non-interacting fermions. Such calculations are performed numerically and repeated for a number of samples, which are obtained by selecting the random variables from the given distribution using a random number generator. The results from the different samples are averaged in order to obtain the density of states, from which the free energy can be calculated, and the eigenvectors, from which the transformations can be inverted. From these we calculate the specific heat and the field-induced magnetization at various temperatures. Such analytical-numerical procedure has the advantage of giving more reliable results at a lower computational cost. We perform the described calculations for a 2000 site chain and 100 samples. In the small field limit the results are compared to the exact ones obtained for the Ising model in the absence of a field.

[1] S. Katsura, Phys. Rev. 127, 1508 (1962).

[2] S. A. Pikin and V. M. Tsukernik, Zh. Eksp. Theor. Phys. 50, 1377 (1966).

[3] H. Braeter and J. M. Kowalski, Physica A87, 243 (1977)

## TWO-DIMENSIONAL FOAMS ARE VORONOÏ PARTITIONS

**Cristian F. Moukarzel**

HLRZ-KFA Jülich, Germany

Voronoi tessellations or partitions are assignments of space to a set of points, according to some metric rule. In its simplest form, one assigns to each point the subset of space which is closer to it than to any other. These constructions give rise to cellular structures which have a vague resemblance to foams and other cellular structures found in nature. In this report, a rigorous connection between two-dimensional soap foams and a class of Voronoi partitions is shown to exist. It is shown that the multiplicative generalization of Voronoi partitions, which has circular interfaces, can be used to describe all equilibrated two-dimensional foams. The pressure- and force equilibrium conditions, that each vertex of an equilibrated foam must satisfy, impose certain geometrical constraints which are equivalent to the foam being a Voronoi tessellation. The main result of this work is to show that any equilibrated two-dimensional foam can be seen as a cut, with a two dimensional plane, of a three-dimensional multiplicative Voronoi partition. This equivalence provides a new set of degrees of freedom for the description of foams: the locations and intensities of the seeds, of which there is one per bubble. It also suggests a new approach for numerical studies of the dynamics of foams, since they can be simulated as a Voronoi tessellation, the seeds of which move in three dimensional space.

## ESTRUTURAS CONVECTIVAS DE GRANDE COMPRIMENTO DE ONDA

*José Pontes*

Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais  
Coordenação dos Programas de Pós-Graduação em Engenharia  
Universidade Federal do Rio de Janeiro

*Palavras-Chave:* Convecção, Estruturas dissipativas, Não linearidade

No decorrer da década de 60 consolidou-se a noção de que uma importante classe de sistemas, abrangendo desde cadeias de osciladores mecânicos ou eletrônicos a sistemas óticos, biológicos ou de reação-difusão entre outros, apresentam comportamento com características suficientemente similares, que permitem identificá-los como fracamente não-lineares. Estes sistemas apresentam uma transição, quando o esforço a que são submetidos ultrapassa um valor crítico ou de bifurcação, em que o estado inicial, solução das equações que descrevem a evolução dos mesmos, torna-se instável e é substituído por outro, mais estruturado, e que cresce de forma exponencial, imediatamente acima deste ponto. Sistemas fracamente não-lineares caracterizam-se pela existência de uma vizinhança acima do ponto de bifurcação, em que o comportamento dos mesmos é descrito essencialmente em termos dos modos mais instáveis linearmente, cuja amplitude satura-se em valor finito. Exemplo de sistema fracamente não-linear são as células de convecção de Bénard.

Com o desenvolvimento dos métodos assintóticos surgiram modelos e equações mais simples do que as equações completas que descrevem a evolução de tais sistemas, que possibilitaram considerável avanço na compreensão do comportamento dos mesmos. Serão discutidos alguns conceitos relativos a sistemas fracamente não-lineares e apresentados resultados referentes à seleção de motivos, ao conteúdo harmônico, e a características e métodos de identificação do estado assintótico de estruturas com elevado comprimento de onda desenvolvidas em células de Bénard de grandes dimensões contendo fluido com elevado número de Prandtl. Os resultados, obtidos por integração numérica de equação introduzida por Knobloch (Physica D 41, 450 [1990] ) confirmam e estendem os obtidos através da análise da estabilidade de estruturas com pequeno número de modos, existentes na literatura.

## SINGLE BAND GAP DENSITIES DETERMINATION WITHIN THE RECURSION METHOD

*José C. Cressoni*

Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas

*Key Words:* Recursion Method, amorphous systems, density of states

The recursion method is a well known numerical technique generally used in solid state physics for determining local energy densities of states (ldos). The method can describe both crystalline and non-crystalline systems and it attempts to computing a diagonal matrix element of the Green's function  $(E - H)^{-1}$  in terms of a continued fraction whose infinite tail can be handled with a terminator  $g_n(E)$ . It works well for a connected spectrum but in the presence of gaps it gets much more complicated due to the more complex form of the terminator. The complete determination of  $g_n(E)$  involves big clusters so that the continued fraction coefficients reach an asymptotic region which allows the determination of the parameters entering into  $g_n(E)$ . A self-consistent procedure introduced by N. Beer allows one to obtain such parameters when only a few levels of the continued fraction are known, which saves a lot of computing time and memory. This procedure needs an initial guess for the position and size of both the gap and the whole band. The method, however, must be handled with great care since it can cause loss of weights and misplacing of the gap due to an occasional and unpredictable appearance of a state inside the gap. In this work one presents a simple way to control Beer's single band gap optimized termination procedure. One shows that the initial input of the (unknown) size of the gap is the main source of errors in Beer's approach. One also shows how to recognize suitable gap sizes thus avoiding such errors. This brings much more reliability in the use of Beer's method to the determination of single band gap ldos. This can be of great value in the determination of ldos both for crystalline and amorphous materials and in simulations when one needs to know the density of states of a particular configuration of a quantum system. This implementation has actually already been used with great success in the study of the structural trends within the sp-bonded elements.

## ESTUDO DA HIDRATAÇÃO DE ÍONS MONOATÔMICOS POR SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO

*Clovis Quintale Junior, Eliane Umeda*

Centro de Ciências Exatas, Naturais e Tecnológicas

Universidade de Ribeirão Preto - UNAERP

14096-380 Ribeirão Preto, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* hidratação, íons, Monte Carlo

Foram obtidos dados estruturais sobre camadas de hidratação de cinco cátions ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ) e dois ânions ( $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ), por simulação de Monte Carlo NpT em soluções infinitamente diluídas com uso de funções de distribuição multi-variáveis. As primeira e segunda camadas de hidratação foram definidas como estando entre os mínimos da função de distribuição radial íon-átomos de oxigênio das moléculas de água. A estrutura da primeira camada é determinada essencialmente pela carga eletrostática dos íons, deste modo a primeira camada parece ser sempre constituída por seis moléculas localizadas nos vértices de um octaedro, exceto nos casos onde a distância entre a carga do íon e a carga contrária na molécula de água é suficientemente grande para haver um impedimento estérico, como no caso do  $\text{K}^+$  que apresenta oito moléculas na sua primeira camada. Em todos os casos os pares de átomos de hidrogênio são preferencialmente perpendiculares. Nas estruturas das segundas camadas predomina a estrutura tetraédrica induzidas pelas moléculas de água aproximadamente do mesmo modo para cátions e ânions. As duas camadas de hidratação são estabilizadas pela forte atração iônica com moléculas de água contrabalançada pela repulsão entre as moléculas de água.

## ALGORÍTMO GENÉTICO PARA VIDROS DE SPIN COM DISTRIBUIÇÃO CONTÍNUA DE CONSTANTES DE ACOPLAMENTO.

*Cláudia S. Simões e J. R. Drugowich de Felício*  
Departamento de Física e Matemática  
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto-USP.

*Palavras-chave:* algoritmo genético, vidros de spin, estado fundamental

Encontrar o estado fundamental de um sistema de spins com frustração tem sido um teste relevante para técnicas de otimização. A dificuldade reside no perfil de energia exibido por sistemas desse tipo que inclui uma série de mínimos locais, separados dos verdadeiros mínimos por barreiras muito grandes. O problema já foi atacado via simulações de Monte Carlo, análise da matriz de transferência e simulated annealing. Mais recentemente, porém, ganhou força a abordagem pelo algoritmo genético, uma técnica proposta por Holland e inspirada na evolução e adaptação dos sistemas naturais. No caso do vidro de spin de Edwards-Anderson (acoplamentos  $\pm J$  apenas entre primeiros vizinhos), essa implementação foi adequadamente feita por Sutton e colaboradores (*J. de Physique I*, 4, 1281, 1994) que estimaram em  $-1.40 \pm 0.05$  a energia por sítio do estado fundamental (em unidades de  $J$ ) para o caso bidimensional. Motivados pela qualidade dos resultados mencionados, examinamos o caso em que a distribuição bimodal das constantes de acoplamento é relaxada a uma distribuição contínua e uniforme no intervalo  $[-1, 1]$  (distribuição square). Investigamos também o caso onde estas constantes obedecem uma distribuição gaussiana, com média zero e variância um. Para implementar o algoritmo cada indivíduo da população (amostra) foi associado a um conjunto de inteiros, cujos bits representam os spins. Funções "built-in" como BJTEST e MOD foram utilizadas para realizar as operações de mutação, crossover e reprodução e os resultados obtidos para a energia do estado fundamental compararam-se bem com aqueles encontrados por Cheung e McMillan através da aplicação repetida da matriz de transferência.

(CAPES, CNPq, FAPESP)

## PROPRIEDADES DINÂMICAS DE AGLOMERADOS DE CARGAS CONFINADOS

*Ladir Cândido, J. P. Rino e Nelson Studart*  
Universidade Federal de São Carlos - SP

*Palavras-Chave:* plasma de uma componente, aglomerados de cargas, dinâmica molecular

Estudamos as propriedades dinâmicas de um sistema clássico bidimensional consistindo de um número finito de partículas carregadas que são confinadas lateralmente por um potencial artificial. Este sistema é o análogo clássico do bem conhecido sistema "quantum dot". Usando a técnica de simulação por dinâmica molecular obtemos as possíveis estruturas ordenadas e a respectiva transição de fase. As partículas se juntam formando uma estrutura de anéis. Obtemos a tabela do tipo de Mendeleev para tais átomos clássicos. Quando o tamanho do sistema fica suficientemente grande, a estrutura de anéis desaparece gradualmente no centro do sistema, e as características de uma rede triangular aparecem, uma vez que a maioria das partículas tem número de coordenação seis. Dessa forma, competem dois tipos de ordenamento: ordenamento em estrutura do tipo rede triangular (rede de Wigner) e em um ordenamento em estrutura de camada (anéis). A rede triangular é uma configuração característica dos sistemas bidimensionais de partículas enquanto que a estrutura de camadas é imposta pela simetria circular do potencial de confinamento. As funções de auto correlação de velocidade e velocidade angular bem como seus espectros de excitação foram obtidas. Para sistemas com um número pequeno de partículas as excitações de baixa energia correspondem a rotações inter-anéis, enquanto que para um número grande de partículas essas excitações correspondem a pares de vórtices e anti-vórtices. A transição de fase nessas estruturas ordenadas foi investigada como função da temperatura. A transição ordem-desordem dá-se em dois estágios: a baixas temperaturas as partículas estão localizadas em torno de suas posições de equilíbrio. Com o aumento da temperatura as partículas começam a se difundir pelos anéis e conseqüentemente a correlação inter-anéis é destruída. À temperatura mais alta a segunda transição acontece quando as partículas difundem entre os anéis. Para sistema com um número grande de partículas ambas as transições coincidem e ocorrem à temperatura de transição prevista para a rede de Wigner bidimensional.

(CAPES, CNPq, FAPESP)

## ESTUDO DA INFILTRAÇÃO PREFERENCIAL EM 3-D, EM UM MEIO POROSO, ATRAVÉS DE IMAGENS E PERCOLAÇÃO POR INVASÃO

*Posadas, D.A.N.<sup>1</sup>, Onody, R.N.<sup>2</sup>, Tammis, A.<sup>2</sup>, Panepucci, C.H.<sup>2</sup>, Crestana, S.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Centro Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento de Instrumentação Agropecuária-CNPDIA-EMBRAPA, Cx. P. 741, CEP 13560-970, São Carlos, SP.

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos-IFSC-USP, Cx. P. 369, CEP 13560-250, São Carlos, SP.

*Palavras-Chave:* "fingering", imagens, percolação por invasão

Os mecanismos que levam a inumeráveis fenômenos físicos durante os processos de transporte em meios porosos são encontrados em muitas áreas das ciências aplicadas de grande interesse econômico e ambiental como, em Engenharia de Petróleo, Reologia, Sistemas Particulados, Industrias de Alimentos, Física de Solos e Hidrologia. Um destes fenômenos é o chamado "fingering" que ocorre em solos permitindo com que, substâncias contaminantes possam se deslocar a altas velocidades através da matriz do solo e contaminar o lençol freático, convertendo-se assim em um dos mecanismos mais importantes de contaminação dos mananciais. Com o intuito de estudar o fenômeno "fingering" em solos não-saturados, foram realizados, em laboratório, experimentos em três dimensões. Utilizando-se uma coluna cúbica de 15x15x15 cm<sup>3</sup> de solo estratificado, foi acompanhado a infiltração de água, em condições de equilíbrio hidrodinâmico, usando imagen obtidas através da técnica de ressonância magnética. Foram realizadas aquisições ao longo da vertical da coluna cúbica obtendo-se 12 fatias transversais e 12 fatias coronais de 1,0 cm de espessura cada uma e espaçadas 1,0 mm entre bordas. A dinâmica dos "fingers" também foi acompanhada utilizando-se um tomógrafo médico de raios X de quarta geração. Através da teoria fractal foi caracterizada a morfologia dos "fingers" ao longo da vertical e através de cada fatia. Do ponto de vista teórico, foi estudada a característica morfológica dos "fingers" através de uma generalização de um modelo de percolação por invasão recentemente introduzido com sucesso em experimentos bidimensionais (Onody et al. 1995. J. Appl. Phys. 2770-2777). Dos resultados obtidos, através das imagens, tanto com o tomógrafo de ressonância magnética quanto com o tomógrafo médico de raios X, ficou evidente a variabilidade espacial e temporal do fenômeno, assim como o caráter fractal das estruturas tridimensionais dos "fingers" (CNPQ/RHAE, EMBRAPA projeto 12.0.93.094 e FAPESP).

### The Schrödinger-Langevin formalism: quantum random walk and free particle problems

Manuel O. Cáceres and Ana K. Chattah

Centro Atômico Bariloche (C.N.E.A.) and Fa.M.A.F. (U.N.C.)- Argentina

We derive a Quantum Master Equation by generalizing the van Kampen method of the Schrödinger-Langevin equation, for the case of non white quantum noise. This formalism gives an alternative way of arriving to the Kossakowski-Lindblad (K-L) quantum semigroups. Quantum semigroups allows to study the dynamic of quantum systems in contact with thermal bath with finite temperature. The quantum correlation time of the bath is taking into account doing a perturbative expansion in order of the thermal correlation time  $\hbar/k_B T$ ; in the first order this expansion gives the Markovian approximation. We arrive to a Fluctuation-Dissipation like relation, which preserves the normalization on the density matrix  $\rho$ . In this work we consider the bath modeled by an infinite set of harmonic oscillators, but another models of bath can be formulated with this formalism. As an example we work out a tight-binding like hamiltonian in interaction with a phonon bath (a quantum random walk). This model shows that the dissipation produces a dispersion in the position operator, of the random walk type. We also show that in the continuous limit (that in this case corresponds to a free particle Hamiltonian) several kinds of interaction between the quantum system and the thermal bath can be modeled. We show that the dispersion of the position operator will grow as  $t^3$  or  $t$ , depending the interaction operators with the bath. We also show that in classical limit, a generalized Fokker-Planck equation is obtained.

## PROPRIEDADES CRÍTICAS DA TRANSIÇÃO SUPERCONDUTORA-ISOLANTE EM SISTEMAS DE BÓSONS BIDIMENSIONAIS

*Djalma Medeiros\* e A. Peter Young†*

\*Departamento de Física Geral e Aplicada, Universidade São Francisco

†Physics Department, University of California at Santa Cruz

*Palavras-Chave:* bósons em 2-d, transições de fases, supercondutores-isolantes

Experiências em vários sistemas bidimensionais têm mostrado a existência de uma transição de fases quântica contínua em temperatura nula, entre as fases supercondutora e isolante. Exemplos de tais sistemas são filmes metálicos, junções de Josephson e filmes de supercondutores cerâmicos. Experimentalmente, a transição pode ser estudada variando, por exemplo, a espessura do filme, a qual efetivamente controla a magnitude da desordem no sistema. Investigações teóricas, sugerem que a física destes sistemas é bem descrita por um modelo de bósons interagentes em um potencial randômico. Para sistemas quânticos bidimensionais, não são conhecidos procedimentos analíticos exatos, de modo que métodos numéricos são a ferramenta natural para tratar estes modelos. O nosso estudo está baseado na diagonalização exata do Hamiltoniano para redes quadradas de até 25 sítios, usando o método de Lanczos. Informações a respeito do limite termodinâmico e a determinação de grandezas relacionadas ao comportamento crítico, são obtidas através das técnicas de *finite-size scaling*. Dados computacionais para a rigidez (*stiffness*), a razão de momentos do parâmetro de ordem e outras grandezas relevantes, em função da desordem  $\Delta$ , indicam claramente uma transição entre uma fase supercondutora ( $\Delta < 1.25$ ) e isolante ( $\Delta > 1.25$ ). Exatamente no ponto crítico, o sistema é metálico. O expoente crítico  $\nu$  que caracteriza a divergência do comprimento de correlação é estimado como  $\nu \simeq 1$ , enquanto o expoente crítico dinâmico  $z$ , relacionado as correlações temporais, é da ordem de 2. Estes valores estão em concordância com as relações entre os expoentes críticos obtidos por teoria de *scaling*.

### The Eletron Localization Problem via a Local Functional Integral Approach

*L.C. Botelho<sup>1</sup>, E.P. da Silva<sup>2</sup>, M.L. Lyra<sup>3</sup> and S.B. Cavalcanti<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Pará,  
Campus do Guama, Belém, Pará, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Antiga Rio São Paulo KM 47, 23851, Rio de Janeiro, Brasil

<sup>3</sup>Departamento de Física, Universidade Federal de Alagoas  
Maceió AL 57072/970, Brasil

*Palavras-Chave:* Quantum Diffusion - Eletron Localization - Disordered System.

Several physical processes such as the growth of interfaces, driven diffusion, wave propagation in random media, among many others, are described by nonlinear diffusion equations which exhibit nontrivial dynamical behaviour. Through a nonlinear transformation these equations may be mapped onto a diffusion equation with random sources and sinks related to directed polymers in random media as well as the evolution of a quantum particle in a random potential. The task of working analytically with differential stochastic equations is a difficult one and usually is necessary to solve these equations numerically. Recently, a local functional integral representation of the diffusion equation in a D-dimensional infinite medium, has been successfully employed yielding to a power law decay of the two-point correlation function. The functional integral representation is suitable to extract the scaling behaviour of a system that satisfies a stochastic nonlinear differential equation. The quantum motion of a particle in disordered media has been studied in the context of the Schroedinger equation with a random potential or its discrete analogue - the Anderson model. The behaviour of the electronic wave function is of crucial importance for a variety of transport phenomena. Here the motion of a quantum particle in one-dimensional white noise random potential is considered within a functional representation of the Schroedinger equation. Our aim is to illustrate the functional approach to obtain the localized character of the particle's wave function via its statistical properties, that is, we evaluate the two-point correlation function with the knowledge of the functional integral representation.

## OPTIMIZATION OF NON-LINEAR GRAVITY MODELS THROUGH GSA

*Kleber C. Mundim, Thierry J. Lemaire and Amin Bassrei*  
Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia

*Palavras-Chave:* gravity inversion, non-linear optimization, simulated annealing

In this work we apply the Generalized Simulated Annealing (GSA) approach to the inversion of gravity data for 2-D and 3-D density distributions. The inversion of gravity data can lead to either linear or non-linear problems. The latter deals with a situation where any coordinate of the anomalous body is unknown, and for the former the only unknown is usually the density distribution. This work deals with the non-linear case, which is the main target of global search methods. However, in order to compare our result to a standard inversion method, one of our examples considers a linear case. There are different methods to attack this problem. The most usual technique is based on gradient methods principally if the cost function ( $f$ ) is convex, i.e. has a single minimum. But if  $f$  has multiple extrema (nonconvex function), more sophisticated methods must be used, in order to not get trapped in one of the local minima. This kind of method has the advantage to map local and global minima. Relatively recently, the called Simulated Annealing methods have demonstrated important successes for a variety of global minimization problems. The underlying principle of the simulated annealing method is in its analogy with the thermodynamics, especially with the way that liquids freeze and crystallize or metals cool and anneal. More recently Stariolo and Tsallis (*Annual Reviews of Computational Physics II*, D. Stauffer (ed.) World Scientific, 1994), based on the thermostatic theory have generalized this approach which is referred to GSA. It contains both Boltzmann and Cauchy machines as particular cases, with the supplementary bonus of providing an algorithm which is even quicker than the Fast Simulated Annealing. We verified the feasibility of this approach to solve inverse gravity problems. From the presented examples we conclude that GSA shows a precise performance, although the computation time is rather expensive, a problem present in all global search methods.

(CNPq)

## UM MODELO DE AUTÔMATOS CELULARES PARA A FORMAÇÃO DE RIOS

*Marcelo Lobato Martins, Aurélio Carlos Silva e Orlando Pinheiro da Fonseca Rodrigues*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, MG

*Palavras-Chave:* autômatos celulares, fractais, criticalidade auto-organizada

A geometria fractal é especialmente adequada para a caracterização de superfícies aleatórias, tais como aquelas presentes no relevo terrestre. Em particular, as montanhas e os rios exibem padrões com características fractais e multifractais. Uma vez que os padrões geológicos mais comuns podem ser descritos em termos dessa geometria, surge a pergunta acerca dos mecanismos responsáveis pela produção dessas estruturas fractais na evolução geomorfológica. Esta é uma questão difícil de se responder porque vários processos envolvidos na formação dessas estruturas são complexos, possuem origem diversas e operam em períodos de tempo extremamente longos.

Nesse trabalho analisamos superfícies submetidas a erosão provocada pela água em um micromodelo experimental de redes hidrográficas. Variando o tipo de solo e a inclinação do terreno observamos como, a partir de uma superfície inicial plana, evoluem padrões hidrográficos fractais.

Além disso, construímos um modelo computacional simples para a evolução de uma rede hidrográfica. Nesse modelo o solo é representado por um rede bidimensional cuja configuração inicial, especificada pela altura ( $h_i$ ) da superfície do solo e pela intensidade do fluxo da água ( $S_i$ ) evolui de acordo com as regras que simulam i) o fluxo de água em direção às regiões de mínimo potencial gravitacional e ii) a erosão provocada por esse fluxo no solo. A partir da simulação computacional calculamos diversas relações de escala (distribuição de tamanhos e perímetros das bacias, etc.) exibidas pelos padrões obtidos. Esses resultados em acordo com aqueles observados em redes hidrográficas naturais, demonstram que a erosão de uma superfície pela água pode dar origem a um tipo de estado crítico gerado espontaneamente pela evolução dinâmica do sistema é caracterizado por padrões fractais.

## MODELO HEISENBERG DECORADO: APLICAÇÃO AO $\text{La}_{2-p}\text{Ba}_p\text{CuO}_4$

J. Ricardo de Sousa<sup>a</sup> e I.P. Fittipaldi<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Centro Internacional de Física da Matéria Condensada-UNB  
70919-970 Brasília-DF

<sup>b</sup>Departamento de Física, CCEN-UFPE  
50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras Chave:* Heisenberg, decorado

Neste trabalho o modelo de Ising aleatoriamente decorado tratado recentemente na literatura por Fittipaldi et al.<sup>1</sup> é estendido para o caso Heisenberg. O modelo consiste de planos nos quais spins nodais interagem antiferromagneticamente ( $J < 0$ ) com seus vizinhos mais próximos e ferromagneticamente ( $K > 0$ ) com spins decorados localizados sobre as ligações entre eles, os quais são distribuídos de forma aleatória nos pontos da rede, segundo uma distribuição temperada. Estes planos, que por sua vez simulam as camadas de  $\text{CuO}_4$  nos materiais supercondutores de altas temperaturas, interagem antiferromagneticamente ( $J = \lambda J$ ) entre si. Usando-se o método de grupo de renormalização na aproximação de campo efetivo (EFRG) introduzido na Ref.[2], discute-se o limite de estabilidade da fase antiferromagnética tridimensional no plano T-p para valores selecionados dos parâmetros de exchange inter- e intraplanos,  $\lambda =$  e  $\alpha J / K$ , respectivamente. Em particular, o valor estimado para  $p_c$  [i.e.  $T_N(p_c) = 0$ ] revela boa concordância com o dado experimental obtido por Kitaoka et al. [3] para o  $(\text{La}_{1-p}\text{Ba}_p)\text{CuO}_4$  na fase isolante não supercondutora.

<sup>1</sup>I.P. Fittipaldi, J.R. de Souza & R.J.V. dos Santos, J. Mag. Mag. Mat. 104-107, 279 (1992).

<sup>2</sup>J.R. de Souza & I.P. Fittipaldi, J. Appl. Phys. 75 (10), 5835 (1994).

<sup>3</sup>Y. Kitaoka et al., J. Phys. Soc. Jpn. 57, 734 (1988).

## EFEITOS DE TAMANHO NO HAMILTONIANO DE HEISENBERG VIA O ANSATZ DE BETHE

*Eduardo Peres Novais de Sá e Guillermo Cabrera*

Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

*Palavras-Chave:* bethe, heisenberg, scaling

O Hamiltoniano de Heisenberg unidimensional (spin 1/2), com acoplamento antiferromagnético entre primeiros vizinhos, é um dos poucos problemas de muitos corpos que admite solução exata. Esta foi obtida por Bethe em 1931, formulando as bases das técnicas matemáticas hoje conhecidas genericamente como soluções tipo Ansatz de Bethe. Para sistemas finitos, as técnicas analíticas mencionadas acima podem ser combinadas com métodos numéricos, sendo assim um ótimo campo de trabalho para o desenvolvimento do chamado *finite size scaling*. As equações do Ansatz de Bethe são não lineares, sendo desconhecido o número de soluções e de difícil identificação os diferentes estados correspondentes. Usualmente são empregados métodos numéricos para diagonalização do hamiltoniano, tais como Lanczos, para solucionar cadeias de até 30 spins. Através destes estados bem conhecidos foi possível identificar inequivocamente algumas soluções das equações do Ansatz. No presente trabalho, usando o Ansatz de Bethe, resolvemos numericamente cadeias de até 1000 spins para interações anisotrópicas com e sem campo magnético aplicado, para valores da anisotropia uniaxial entre 0 e 1. O espectro das energias é resolvido parcialmente para alguns estados distintos, incluindo o estado fundamental e vários estados excitados. Em particular, obtemos o *gap* da onda de spin como função da anisotropia e do tamanho. Este *gap* está ligado a uma outra grandeza importante no problema com campo magnético: o chamado Campo Crítico em um antiferromagneto. Juntamente com a extrapolação do valor do Campo Crítico para o sistema infinito, foi feito o estudo dos efeitos de tamanho como função da anisotropia da interação. Usando-se técnicas de *finite size scaling* determinamos a lei de escala correspondente ao *gap* da onda de spin.

## RANDOM ISOTROPIC XY CHAIN

*Kerson Rocha Jr., A. P. Vieira and L. L. Gonçalves*  
Departamento de Física - UFCe

*Palavras-Chave:* XY model, transverse field, random systems

The one-dimensional  $s=1/2$  XY model [1], closed chain ( $N$  sites), with random isotropic coupling constants in a random transverse field [2] is considered. We will treat two particular cases, namely, (a) uniform field and random coupling constants and (b) random field and uniform coupling constants. For the first case the random coupling constants are assumed to satisfy the bimodal annealed distribution

$$\rho(J_j) = p\delta(J_j - J_A) + (1-p)\delta(J_j - J_B),$$

and for the second case the transverse field is taken from an arbitrary distribution. The method of solution for both cases is the following: by using the Jordan-Wigner fermionization and a canonical transformation the problem is reduced to computing the eigenvalues and eigenvectors of a  $N \times N$  matrix, corresponding to a problem of  $N$  non-interacting fermions. Such calculations are performed numerically and repeated for various samples, which are obtained by selecting the random variables from the given distributions using a random number generator. The results from the different samples are averaged in order to obtain the density of states, from which the free energy can be calculated, and the eigenvectors, from which the transformations can be inverted. From these we calculate the specific heat and the field-induced magnetization at different temperatures. We perform the described calculations for a 2000 site chain and 100 samples. For the case in which the field satisfies a Lorentzian distribution with uniform coupling constants the results are compared to the exact ones [3].

[1] E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).

[2] O. Derzhko and T. Krokmal'skii, *Ferroelectrics* **153**, 55 (1994).

[3] H. Nishimori, *Phys. Lett. A* **100**, 239 (1984).

## INTERAÇÕES HIPERFINAS EM $GdAl_2$ ATRAVÉS DA TÉCNICA TDPAC

M. Olzon-Dionysio\*, S. D. de Souza\* e M. Forker\*\*

\* Dep. Física / UFSCar-S. Carlos-SP      \*\*ISKP-Bonn-Alemanha

*Palavras-Chave:* interações hiperfinas, terra rara, tdpac

Os compostos cúbicos de Laves  $TR Al_2$  (TR= Terra Rara) constituem-se um sistema ideal para o estudo do comportamento dos átomos de TR nos metais. [1]

Neste trabalho apresentamos uma discussão dos resultados de TDPAC usando  $^{111}In$  como ponta de prova, em amostra de  $GdAl_2$ . O  $^{111}In$ , livre de carregador, foi difundido na amostra (pré-fundida em forno de arco), durante 12 horas, a uma temperatura de  $800^\circ C$ . As medidas foram feitas em um sistema convencional de quatro detectores de  $BaF_2$ , na fase paramagnética, no intervalo de temperatura de 175 a 1000 K.

Os resultados dos ajustes das curvas experimentais de  $A_{22}G_{22}(t)$  à função teórica indicam que a ponta de prova ocupa um único sítio na rede, em acordo com um estudo anterior [2]. Este sítio corresponde ao do Al, que ocupa sítios estruturalmente equivalentes, de simetria romboédrica. Obtivemos ainda a frequência quadrupolar decrescente linearmente com o aumento da temperatura. Os resultados revelam também o aparecimento de uma segunda fase na amostra, a partir de  $T=700K$ , que também cai linearmente com T.

### REFERÊNCIAS:

- [1] Purwins, H.G. & Leson, A. - *Advances in Phys.* **39** (4), (1990) 309-405.  
[2] Mishra, S. N. et al. - *Phys. Letters* **91A** (4), (1982) 193-6.

( FAPESP)

## NMR Measurements in Milled Gd-TM<sub>2</sub> (TM= Co, Fe)

C.V.B. Tribuzy<sup>1</sup>, A. Biondo<sup>2</sup>, C. Larica<sup>2</sup>, K.M.B. Alves<sup>2</sup> and A.P. Guimarães<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180 Rio de Janeiro - RJ, Brazil

<sup>2</sup>Depto. de Física - Universidade Federal do Espírito Santo, 29069-900 Vitória - ES, Brazil

*Palavras-chave:* NMR, Milling, Amorphous

Mechanical grinding is an effective method of producing non-equilibrium phases starting from powders of compounds or alloys. We have studied by X-ray diffraction and NMR the effects of milling of the crystallized intermetallic compounds  $GdFe_2$  and  $GdCo_2$ . The samples were milled inside a cylindrical tool made of hard steel, under argon atmosphere, for several different time intervals. The initial compounds were produced from high purity elements in an arc furnace, under inert atmosphere. The X-ray analysis showed that the milling of these compounds had induced amorphization and segregation. The spin-echo pulse NMR technique was utilized to study some structural and magnetic properties as a function of milling time. The measurements were made using a broad-band pulse NMR spectrometer which operates from 20 to 100 MHz. Above 1 hour the milling of  $GdFe_2$  leads to segregation of  $\alpha$ -Fe and formation of a Gd-Fe phase, as shown in the X-ray. The NMR spectra of  $^{155}Gd$  and  $^{157}Gd$  confirm these results, showing new broad lines at a displaced position. The X-ray of milled  $GdCo_2$  presents broad lines above 3 hours, and a phase decomposition process into amorphous Gd-Co and bcc Co, above 5 hours. Through the resonance of  $^{59}Co$  we observe broader lines and hyperfine fields that do not change much with milling time. The segregation in Gd-Co samples is not evident in our NMR measurements, since the cobalt frequency is above the range of the spectrometer. We can also observe through these techniques the different kinds of disorder that are introduced in the lattice, which may lead to opposite tendencies in the X-ray and NMR spectra.

## FLUTUAÇÃO DE SPIN E TRANSIÇÃO DE FASE NOS COMPOSTOS $RCO_2$ (R = TERRA RARA PESADA)

F. Garcia, M. R. Soares, A. Y. Takeuchi e S. F. da Cunha  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ

*Palavras-Chave:* flutuação de spin,  $RCO_2$ , modelo de Inoue-Shimizu

As propriedades elétricas e magnéticas dos compostos intermetálicos  $RCO_2$  (R = terra rara pesada) têm sido objeto de estudo durante vários anos, tanto experimental quanto teórico. Nestes compostos, estas propriedades são determinadas pelas peculiaridades da estrutura eletrônica. Para R = Er, Ho e Dy os compostos apresentam transição de fase magnética de primeira ordem enquanto que para R = Gd e Tb a transição é de segunda ordem. O objetivo deste trabalho é mostrar os mecanismos envolvidos no processo de transição de fase de primeira ordem e explicar o porquê da mudança na ordem da transição de fase. Neste trabalho são apresentadas medidas de difração de raios-X, resistividade elétrica, magnetização e suscetibilidade magnética AC nos sistemas  $(Er_{1-x}Tb_x)Co_2$  e  $(Er_{1-x}Ho_x)Co_2$ . Foram fabricadas as seguintes amostras:  $x = 0.00, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.40, 0.60, 0.80$  e  $1.00$  e  $x = 0.00, 0.20, 0.40, 0.60, 0.80$  e  $1.00$ , respectivamente. Destas medidas pôde ser concluído que as amostras da série  $(Er_{1-x}Tb_x)Co_2$  cuja temperatura de transição é menor do que 150K ( $x \leq 0.40$ ) apresentam transição de fase de primeira ordem e as demais ( $x \geq 0.60$ ) apresentam de segunda ordem. Na série  $(Er_{1-x}Ho_x)Co_2$  todas as amostras apresentam  $T_C < 75K$  com transições de fase de primeira ordem. A aplicação do modelo de Inoue-Shimizu generalizado às séries, mostrou-se adequado para expressar a ordem da transição. Neste trabalho concluiu-se que a transição de fase de primeira ordem é atribuída à transição metamagnética que ocorre no cobalto. A mudança na ordem da transição (de primeira para segunda) deve-se ao surgimento de um espalhamento extra, que começa a tornar-se eficiente em torno de 125K. Este espalhamento extra tem origem em flutuações de spins dentro de um regime de ordem de longo alcance.

(CNPq)

## STRONGLY CORRELATED ELECTRONIC SYSTEMS AT EXTREME LIMITS\*

Alex Lacerda

National High Magnetic Field Laboratory Los Alamos Facility  
LANL, Los Alamos, NM 87545, USA

During the past two decades several new results in condensed matter physics have attracted the attention of a large number of theoretical and experimental researchers. Among these results are those arising from the intensive study of the materials showing electronic phase transitions. In spite of the great amount of existing experimental work in this field very important questions regarding the nature and properties of the many-body interactions are still unanswered. In this contribution we will try to address some of the open questions in this field, specially the ones related to the physics of Strongly Correlated Electronic Systems (SCES). SCES is very general classification used to describe, phenomenologically, the many-body interactions of a very wide family of materials. These systems include: Heavy Fermion (HF) compounds, Intermediate-Valence (IV) compounds, and Kondo Insulators (KI) systems. Even though these materials have been studied intensively for the past decade, the need for performing experiments at extreme conditions of magnetic fields and ultra-low temperatures in order to understand the nature of the magnetic correlations and the extremely rich ground state is still well recognized. This paper presents a review of recent experiments in very high magnetic fields (to 50T) and very low temperatures (down to 40mK) on the magnetotransport of SCES materials performed at the National High Magnetic Field Laboratory, Los Alamos Facility, USA. Two variants of the SCES will be discussed. First the magnetic effects on the thermodynamic and transport properties, in the Fermi Liquid regime, and the metamagnetic-like transition at 35T and 400mK of the heavy fermion compound  $YbAgCu_4$  will be shown. Next I will discuss the controversy of the magnetic field dependence of the energy gap in the Kondo insulator system  $SbB_6$ .

\* Work at Los Alamos was performed under the auspices of the National Science Foundation and US Department of Energy.

## <sup>155,157</sup>Gd NMR of Gd<sub>x</sub>Ni<sub>y</sub> Intermetallic Compounds

V.L.B. de Jesus, V.M.T.S. Barthem, I.S. Oliveira and A.P. Guimarães  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil

*Palavras-chave:* NMR, magnetism, Gd<sub>x</sub>Ni<sub>y</sub>

The technique of pulsed NMR was applied to study the magnetic properties of several intermetallic compounds of the Gd-Ni series: Gd<sub>2</sub>Ni<sub>17</sub>, GdNi<sub>5</sub>, GdNi<sub>3</sub>, GdNi<sub>2</sub> and GdNi using <sup>155</sup>Gd and <sup>157</sup>Gd as nuclear probes. These compounds have different crystallographic structures. The samples were prepared with high purity elements, Gd (4N) and Ni (5N), and melted in an arc furnace. The measurements were performed using an automated NMR spectrometer, at 4.2 K and 1.5 K. In these compounds, the magnetic hyperfine interaction is comparable to the electric quadrupole interaction, and this does not allow a perturbative approach in the analysis of the data; the line positions and intensities had to be calculated numerically, and then compared to the experimental results. From the NMR spectra, the values of the hyperfine fields and the lower limits of the electric field gradients (EFG) at the Gd sites in Gd<sub>2</sub>Ni<sub>17</sub> and in GdNi<sub>5</sub> are very close, 22.70(1) T;  $V_{zz} > 7.0(2) \times 10^{21} \text{V/m}^2$  and 23.32(1) T;  $V_{zz} > 7.1(1) \times 10^{21} \text{V/m}^2$ , respectively. We have also observed a strong quadrupolar interaction at the Gd sites in GdNi<sub>5</sub>, and in one of the sites of the compounds GdNi<sub>3</sub> and Gd<sub>2</sub>Ni<sub>17</sub>. Surprisingly, the same was the case of GdNi<sub>2</sub>, where Gd seats on a high symmetry site. We have tried, without success, to observe the <sup>61</sup>Ni signal. The small isotopic abundance (1.3%) together with the low values of the Curie temperature in these compounds lead to a signal below the sensitivity limit of our spectrometer.

## INVESTIGAÇÃO DE UM NOVO TIPO DE FERROMAGNETISMO METÁLICO FRACO PELA TÉCNICA DE CORRELAÇÃO ANGULAR PERTURBADA

Artur Wilson Carbonari, José Mestnik Filho e Rajendra Narain Saxena  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

*Palavras-Chave:* Campo hiperfino magnético, Correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada, Ligas de Heusler.

O campo hiperfino magnético (CHM) no sítio do <sup>181</sup>Hf - <sup>181</sup>Ta foi medido para as ligas ternárias intermetálicas Pd<sub>2</sub>TiZ, com Z = Al e Sn pela técnica de correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada (CAP) utilizando-se a cascata gama de 133-482 keV do decaimento dos níveis excitados do <sup>181</sup>Ta. As amostras foram preparadas a partir de elementos metálicos de alta pureza pela fusão em um forno de arco, juntamente com a ponta de prova radioativa que substituiu cerca de 0,1% dos átomos de Ti, sendo em seguida tratadas termicamente. Estes compostos apresentam a estrutura cúbica L2<sub>1</sub> bem conhecida das ligas de Heusler com parâmetro de rede de 6,38 Ångstrons para Pd<sub>2</sub>TiSn e 6,32 Ångstrons para Pd<sub>2</sub>TiAl. As medidas de CAP foram realizadas no intervalo 77-1073 K. Semelhante aos materiais que apresentam ferromagnetismo fraco convencional, as ligas estudadas possuem momento magnético por unidade de fórmula baixo, de 0,005  $\mu_B$  e 0,21  $\mu_B$  para o Pd<sub>2</sub>TiSn e Pd<sub>2</sub>TiAl, respectivamente. Foi verificado que a dependência do CHM com a temperatura é semelhante àquela encontrada para materiais ferromagnéticos clássicos dada pela curva de Curie-Weiss, porém mesmo a altas temperaturas ainda foi constatada a presença de campos hiperfinos magnéticos, indicando que a temperatura de Curie destes compostos é bastante alta. Tal fato mostra que estas ligas não podem ser simplesmente classificadas como ferromagnetos itinerantes fracos clássicos, mas sim indica a ocorrência de um novo mecanismo para o comportamento do magnetismo nestes compostos.

( FAPESP )

## ESPECTROSCOPIA MÖSSBAUER DA LUDWIGITA (Mg,Fe)<sub>2</sub>FeBO<sub>3</sub>

*Cássio Stein Moura<sup>(1)</sup>, Renato Bastos Guimarães<sup>(2)</sup>, João Carlos Fernandes<sup>(2)</sup>, Hortêncio A. Borges<sup>(3)</sup>, Milton Torikachvili<sup>(4)</sup>, João Batista Marimon da Cunha<sup>(1)</sup> e Carlos Alberto dos Santos<sup>(1)</sup>*

<sup>(1)</sup>Instituto de Física - UFRGS

<sup>(2)</sup>Instituto de Física - UFF

<sup>(3)</sup>Departamento de Física - PUC/RJ

<sup>(4)</sup>University of California at San Diego - USA

*Palavras-Chave:* ludwigita, superparamagnetismo, espectroscopia mössbauer

A ludwigita faz parte de uma família de minerais oxiboratos, com fórmula ideal do tipo M<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>, onde o metal M é usualmente uma combinação de Mg, Mn e Fe. Esses materiais vêm despertando interesse pelas suas peculiares propriedades magnéticas, entre as quais destacam-se: acoplamentos magnéticos de baixa dimensionalidade, transições de vidro de spin e superparamagnetismo. Para o presente estudo, amostras foram preparadas a partir de quantidades apropriadas de MgO, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. A mistura foi submetida a recozimento em atmosfera de argônio, a uma temperatura de 850 °C, durante 48 horas. Curva de susceptibilidade magnética é típica de sistema 2D, com máximo em 119 K. Medidas de magnetização em baixos campos (B < 1 T) sugerem um tipo de superparamagnetismo em que o momento e o tamanho dos aglomerados aumentam com a temperatura. Medidas de magnetização em altos campos (2 T < B < 18 T) indicam que a magnetização é rigorosamente linear com B para T > 120 K, sugerindo que abaixo de 120 K as interações 3D começam a ser importantes. Objetivando complementar os resultados acima, medidas de espectroscopia Mössbauer foram realizadas com temperatura variando entre 300 K e 4.2 K. Resultados preliminarmente obtidos sugerem que a subrede de Fe<sup>3+</sup> está ordenada, enquanto os íons de Fe<sup>2+</sup> estão desordenadamente diluídos pelos íons Mg<sup>2+</sup>. Por outro lado, acoplamento magnético de longo alcance torna-se evidente apenas para T < 90 K. Este resultado é interessante, pois medidas realizadas em outros materiais de baixa dimensionalidade mostram que a espectroscopia Mössbauer detecta acoplamento magnético de longo alcance em temperaturas inferiores ao do máximo da curva de susceptibilidade. (CNPq, FINEP, CAPES, FAPERGS)

## ESTUDO DO SISTEMA Fe-Pr NA REGIÃO EM TORNO DA REAÇÃO EUTÉTICA

*Francisco Javier de Hoyos, Sergio Gama, Carlos Alberto Ribeiro, Adelino de Aguiar Coelho*  
Instituto de Física, UNICAMP – Universidade Estadual de Campinas

*Francisco de Assis Olimpio Cabral*  
UFRN – Universidade Federal do Rio Grande do Norte

*Palavras-chave:* Fe-Pr, diagrama de fases, análise térmica

A análise térmica diferencial (ATD) de ligas de Fe-Pr apresenta 2 sinais térmicos sequenciais à temperatura de reação eutética, separados por ~ 10°C, para composições variando desde próximo à composição Fe<sub>17</sub>Pr<sub>2</sub> até próximo do Pr puro. Não se tem até hoje uma explicação coerente para estes sinais duplos, mas apenas uma tendência a associar um dos sinais a um eutético metaestável. Em ligas de Fe-Pr resfriadas rapidamente, observa-se o aparecimento de duas fases magnéticas metaestáveis, produtos de solidificação rápida de material rico em Pr, com morfologias claramente identificáveis em análises metalográficas. Tratamentos térmicos curtos a 600°C provocam a dissolução dessas fases metaestáveis nas fases Fe<sub>17</sub>-Pr<sub>2</sub> e Pr, processo acompanhado de fortes modificações na microestrutura e nas propriedades magnéticas das ligas, em particular da coercividade que decai de até 4,3 kOe para zero. O sistema Fe-Pr foi estudado na região em torno da reação eutética, pelos métodos de análise térmica de Smith (ATS), análise termomagnética (ATM), análise metalográfica, microanálise eletrônica, análise calorimétrica de Calvet, além da análise de amostras obtidas em experimentos de crescimento lento de monocristais de Fe-Pr. Neste estudo chegou-se às seguintes conclusões fundamentais: 1) existem duas novas fases com estequiometria Fe<sub>2</sub>Pr<sub>1</sub> e Fe<sub>3</sub>Pr<sub>13</sub>, ambas estáveis num intervalo de temperatura estreito e próximo à temperatura de reação eutética; 2) das duas fases magnéticas metaestáveis formadas em amostras resfriadas rapidamente, uma é estável e corresponde justamente à nova fase Fe<sub>2</sub>Pr<sub>1</sub>, e a outra é realmente metaestável e se dissolve mediante uma reação exotérmica que tem início à temperatura de ~ 530°C. Um novo diagrama de fases para o sistema Fe-Pr é proposto. (Fapesp e CNPq).

## DECOMPOSIÇÃO TÉRMICA DA FASE $\text{Fe}_{17}\text{Sm}_2\text{N}_3$

F. A. O. Cabral <sup>(a)</sup>, S. Gama, C. A. Ribeiro, E. de Moraes, N. L. Sanjurjo

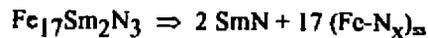
Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Caixa Postal 6165, 13 083-970 Campinas, SP, Brazil

<sup>(a)</sup> Departamento de Física, Centro de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN, Natal, RN, Brasil

**Palavras-Chave:** Decomposição térmica; Nitrogenação; Fases magnéticas

Foi proposto que a fase nitrogenada  $\text{Fe}_{17}\text{Sm}_2\text{N}_3$  é meta-estável acima de 600°C e decompõe-se sob aquecimento, em uma reação na qual o ferro é liberado na amostra e há o desprendimento do nitrogênio livre. Recentemente foi proposto também, que na decomposição da amostra há a formação de nítreto de ferro.

Fizemos uma série de experiências utilizando análise termogravimétrica (TGA), termomagnética (TMA) e difração de raios-X, para estudar o mecanismo de decomposição. Nossos resultados mostram que a decomposição inicia-se a 613°C e segue a seguinte reação:



Neste caso não há liberação do nitrogênio livre na reação mas sim, a formação de uma solução sólida do nitrogênio no ferro. Este nitrogênio forma uma estrutura "shell-core" e começa a sair da amostra por um processo de difusão, de acordo com as leis de Fick. Esta estrutura mostra duas regiões: uma externa (com ferro e pobre em nitrogênio) e uma interna (rica em nitrogênio). Isto é claramente observado no sinal de TMA, que apresenta duas transições largas: uma cuja temperatura de Curie ( $T_c$ ) é 770°C, associada ao ferro puro (região externa) e a outra associada à solução sólida do nitrogênio em ferro (região interna). Esta apresenta uma  $T_c$  variável, dependente da concentração de nitrogênio, e que se aproxima da  $T_c$  do ferro, em função do tempo em que a amostra é mantida em temperatura alta.

(FAPESP, CNPq e RHAEB)

## NONRECIPROCAL REFLECTION OF INFRARED RADIATION FROM ANTIFERROMAGNET / DIELECTRIC STRUCTURES

Thomas Dumelow<sup>1</sup> and Robert E. Camley<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, UFRN.

<sup>2</sup>Dept. of Physics, University of Essex, UK.

<sup>3</sup>Dept. of Physics, University of Colorado at Colorado Springs, USA (permanent address).

**Key-words:** antiferromagnet, polariton, magnon.

Recent experimental studies have examined the reflection of infrared radiation from antiferromagnets. A key feature in these experiments is the occurrence of nonreciprocal reflectivity. Here reversing the directions of the incident and reflected waves leads to a different reflection coefficient when there is an external magnetic field parallel to the surface of the antiferromagnet. However, theoretical studies have shown that for semi-infinite or thin film antiferromagnets nonreciprocity in the reflection intensities can occur only when absorption is present. In the present work we examine theoretically different geometries which also lead to nonreciprocal reflection. Our geometries are physically realistic and include an antiferromagnetic film on a substrate, a dielectric film on an antiferromagnetic film, and a dielectric overlayer on a semi-infinite antiferromagnet. In contrast to earlier results involving only antiferromagnetic films, we find that nonreciprocal reflection occurs even in the absence of any absorption. The calculations are performed for the common Voigt geometry using a transfer matrix method and examples of nonreciprocal reflectivity are shown both with and without damping. In addition to our explicit calculations for specific examples, we also present a general thermodynamic argument showing how the combination of a dielectric film and antiferromagnetic film allows nonreciprocal reflectivity where an antiferromagnetic film by itself does not. Our thermodynamic argument also establish certain symmetry relations between the nonreciprocal reflectivity from the dielectric surface and the nonreciprocal reflectivity from the antiferromagnetic surface of a bilayer structure. With the help of Snell's Law, these relations may be extended to the other structures.

## COMPORTAMENTO MAGNÉTICO DA FASE DE LAVES $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$

*José Antonio H. Coaquira, Hercilio R. Rechenberg*  
Instituto de Física - USP, São Paulo

*palavras-chave:* intermetálicos, magnetização, spin-glass

A capacidade para absorver hidrogênio que apresentam as fases de Laves contendo Zr é de grande interesse em aplicações tecnológicas. Fases de Laves podem-se manifestar cristalograficamente como: fase C15 (cúbica), fase C14 (hexagonal) ou fase C36 (hexagonal). As características magnéticas do sistema  $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$  podem ser magneticamente ordenado na faixa  $x > 0.8$  ou paramagnético para  $0.25 < x < 0.8$ . Por outro lado, as propriedades da fase paramagnética, em baixas temperaturas, não têm sido bem estudadas. Foram preparadas cinco amostras por fusão ( $0.3 < x < 0.7$ ), em um forno de arco voltaico e em atmosfera de argônio. Não foi feito nenhum tratamento térmico adicional. A análise dos difratogramas de raios-X pelo método de Rietveld revelou predomínio (>90%) da fase hexagonal C14 para todas as amostras. As medidas de magnetização foram feitas em um magnetômetro de bobina supercondutora com campos até  $\sim 9T$  e temperaturas que vão desde 4.2 a 300K. As curvas  $M \times H$  para amostras com  $x < 0.5$ , mostram um comportamento singular para campos da ordem de  $\sim 4T$  e temperaturas em torno de 200K sugerindo uma transição magnética; uma outra característica observada é a ausência de saturação para campos bem altos ( $\sim 9T$ ). A suscetibilidade a campos baixos ( $\chi_{dc}$ ), por outro lado, apresenta um pico que sugere a existência de um comportamento "Spin-Glass". A posição do pico para  $x=0.6$  encontra-se em  $T_f \sim 25K$ , tendo-se uma mudança da posição do pico para temperaturas menores quando  $x$  decresce. Os resultados obtidos são discutidos utilizando modelos para "Spin-Glasses".

(CNPq)

## Domain and Domain Walls NMR Signals in $RCo_2$ Intermetallic Compounds

*I.S. Oliveira and A.P. Guimarães*  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil

*Palavras-chave:* NMR, domain walls

NMR signals in magnetic materials generally result from contributions of two regions of the sample, magnetic domains and magnetic domain walls. The amplitude of the NMR signals is increased in these materials, by a factor known as the *enhancement factor*, which in most cases has different values in these two regions, depending upon the wall mobility, the magnetic anisotropy, etc. The separate study of domain and domain wall signals is possible, in principle, by a careful control of the RF power level applied to the sample. In the present work a model is proposed which includes both contributions to the NMR signal; the picture is based on a model originally applied to pure domain wall signals. This allows the computation of the spin echo amplitude in magnetic powder samples. We have compared the predictions of the theory with experimental situations where it has been possible to separate the different contributions to the signal. This has been done with the  $^{59}Co$  resonance in some  $RCo_2$  rare earth intermetallic compounds, where the anisotropy can easily be changed by varying the rare earth; we have analyzed the compounds with  $R=Gd, Dy, Tb$ . The experimental data consist of NMR spectra obtained for different RF power, and curves of signal intensity versus RF power. These curves allow the derivation of the *enhancement factors*. The measurements show, as expected, narrower NMR lines for the excitation conditions corresponding to the domain signals. The *enhancement factors* obtained in the compounds vary from about 10 (domains) to 3500 (domain walls) in the different samples.

## DETECÇÃO DE DEFEITOS EM PLACAS FERROMAGNÉTICAS UTILIZANDO UM SUSCEPTÔMETRO SQUID

A. C. Bruno<sup>1</sup>, A. P. Ewing<sup>2</sup> e J. P. Wikswo, Jr.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Supercondutividade Aplicada e Magnetismo  
Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro  
Rua Marquês de São Vicente 225, Rio de Janeiro, RJ 22453-900

<sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy, Vanderbilt University  
Box 1807 Station B, Nashville, TN 37235, USA

*Palavras-Chave:* Ensaios-Não-Destrutivos, Flux-Leakage, SQUID

Foram detectados defeitos sub-milimétricos em placas ferromagnéticas utilizando um susceptômetro SQUID (Superconducting QUantum Interference Device). A componente normal do campo magnético foi detectada com um gradiômetro de primeira ordem supercondutor com linha de base de 4 cm e com bobinas de 3 mm de diâmetro. Os campos magnéticos aplicados variaram em intensidade de 10 mT a 100 mT e foram aplicados perpendicularmente e ao longo da placa. Defeitos superficiais com volumes de 0.1 mm<sup>3</sup> e profundos através de 1 cm de aço puderam ser detectados. Devido ao ruído magnético gerado pelas regiões da placa sem defeitos, o sinal magnético detectado foi filtrado espacialmente de modo que o sinal devido ao defeitos pudessem ser visualizados. Este método foi comparado com métodos convencionais de flux leakage e se mostrou extremamente mais sensível.

(CNPq, RHAЕ, FINEP, PETROBRÁS)

## SUBSTITUIÇÃO de ND por um "MISCHMETAL" de TERRA RARA em LIGAS Fe-Nd-B

Cleber Santiago Alves<sup>(a)</sup>, Francisco de Assis O. Cabral<sup>(b)</sup>, Roberto Câmara de Araújo, Sergio Gama e Carlos A. Ribeiro

Instituto de Física "Gleb Wataghin" - UNICAMP

<sup>(a)</sup> Departamento de Engenharia Química - UFRN

<sup>(b)</sup> Departamento de Física Teórica e Experimental -UFRN

*Palavras-Chave:* ímãs permanentes, Fe-Nd-B, terras raras

Os ímãs permanentes a base de Fe-Nd-B apresentam excelentes propriedades magnéticas em virtude da fase tetragonal Fe<sub>14</sub>Nd<sub>2</sub>B ferromagnética, com alta magnetização de saturação e uma alta anisotropia magnetocristalina. Esses compostos do tipo 14:2:1 são formados em toda a série dos lantanídeos inclusive o Fe<sub>14</sub>Ce<sub>2</sub>B que também apresenta boas propriedades magnéticas permanentes. O Ce é o elemento majoritário no "Mischmetal" (um produto intermediário entre o minério e os elementos puros e que consiste de uma mistura de terras raras). O alto custo do Nd puro mantém o preço dos ímãs de Fe-Nd-B muito mais alto do que das ferrites. O objetivo deste trabalho é verificar a viabilidade de se produzir ímãs permanentes de alta performance substituindo parcial ou totalmente o Nd por um Mischmetal de terra rara. Para isso, nós estamos utilizando um "mischmetal" brasileiro cuja composição é: 56% Ce, 18% La, 13% Nd, 5% Pr, 2% Fe e 6% de outras terras raras. Ligas com composição Fe<sub>7,4</sub>(Nd<sub>1-x</sub>MM<sub>x</sub>)<sub>20</sub>B<sub>6</sub> foram fundidas a arco e a microestrutura do estado de como fundidas foi investigada através de metalografia óptica, difratometria de raios-x, análise termomagnética e microsonda eletrônica. Os resultados mostram que para uma substituição de até 50% a liga apresenta uma microestrutura bifásica onde uma fase majoritária do tipo Fe<sub>14</sub>(Nd, MM)<sub>2</sub>B ferromagnética com T<sub>c</sub> de 280°C convive com uma fase rica em terra rara. Com o acréscimo na substituição surge uma fase do tipo Fe<sub>2</sub>MM na microestrutura, e o T<sub>c</sub> do composto 14:2:1 decresce. Estes resultados sugerem a possibilidade de se produzir ímãs permanentes de alta performance e baixo custo.

(CAPES, FAPESP, CNPq e RHAЕ)

## ESTUDO DAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE FERRITA DE NÍQUEL E ZINCO OBTIDA POR COPRECIPITAÇÃO

Adriana Silva de Albuquerque<sup>(1)</sup>, José Domingos Ardisson<sup>(1)</sup> e Aba Israel Cohem Persiano<sup>(2)</sup>,  
Waldemar Augusto de Almeida Macedo<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear- CNEN, <sup>(2)</sup> Departamento de Física-UFMG

**Palavras-chave:** ferrita, coprecipitação, magnetização

Ferritas de níquel e zinco são materiais tecnologicamente importantes devido principalmente às suas aplicações na indústria eletrônica, como por exemplo, na fabricação de núcleos magnéticos e cabeçotes para leitura/gravação de fitas ou discos digitais de alta frequência. Muitas das aplicações requerem alta densidade, baixa porosidade e microestrutura controlada, características de partículas ultrafinas. Neste trabalho foram investigadas a obtenção por coprecipitação de partículas ultrafinas de ferrita de níquel e zinco,  $Ni_{0,5}Zn_{0,5}Fe_2O_4$ , e as propriedades magnéticas e hiperfinas deste material. Na preparação das amostras, utilizou-se nitratos metálicos como agentes precursores e hidróxido de sódio como precipitante. Variou-se parâmetros como quantidade de precipitante, concentração da solução precursora e temperatura de calcinação, de modo a se obter amostras com diferentes tamanhos de partículas. Os pós obtidos foram calcinados e caracterizados por difração e fluorescência de raios-X, espectroscopia Mössbauer e magnetometria. As amostras apresentaram tamanho médio de partículas de 20 a 40 nm. Medidas de espectroscopia Mössbauer a 300K e 77K indicaram relaxação superparamagnética nas amostras com diâmetro médio de partículas menores que 30 nm. Medidas de magnetização foram realizadas a 300, 77 e 9K, em pós de ferrita dispersos em matriz polimérica e alinhadas em campo magnético a 1 Tesla. Os valores de remanência, coercividade e magnetização de saturação, a temperatura ambiente, apresentaram um aumento com o crescimento do tamanho médio das partículas, variando de 0,5 a 5,0 emu/g, de 12,0 a 100,0 Oer e de 58,0 a 71,0 emu/g, respectivamente. Observou-se também, um aumento nos valores de remanência e de coercividade em medidas a baixas temperaturas, o que comprova a presença de superparamagnetismo nestes materiais.

(FAPEMIG, CNPq e Finep)

## AGLOMERADOS MAGNÉTICOS EM FERRITAS DILUÍDAS

M. R. da Silva

Instituto de Ciências, EFEI, Caixa Postal 50, CEP 37500-000  
Itajubá, MG, Brasil

J. M. Neto

Instituto de Física, UFRJ, Caixa Postal 68.528, CEP 21 945  
Rio de Janeiro, RJ, Brasil

**Palavras-chave:** ferritas, magnetização, aglomerados magnéticos

Ferritas diluídas apresentam propriedades interessantes de aglomerados de íon de ferro devido à possibilidade de três interações de super-troca: AB, AA e BB [1]. Em algumas matrizes o íon de ferro, em baixas concentrações, não tem preferência definida por sítio A ou B, levando com isso à possibilidade de aglomerados magnéticos onde as três interações acima competem. Para examinar aglomerados de ferro em ferritas diluídas produzimos os materiais:  $MgAl_{2-x}Fe_xO_4$ ,  $MgGa_{2-x}Fe_xO_4$ ,  $ZnAl_{2-x}Fe_xO_4$  e  $ZnGa_{2-x}Fe_xO_4$ , com x igual a: 0,002 - 0,010 - 0,020 - 0,030 - 0,040 - 0,050 - 0,060 - 0,080 - 0,100 - 0,150 - 0,200 - 0,250 - 0,300 - 0,350 - 0,400. Propriedades estruturais [2] (parâmetro de rede e distribuição de íons por sítios da matriz) e medidas magnéticas (susceptibilidade e saturação magnética) destes materiais tentam relacionar, experimentalmente, a hipótese de uma lei de Curie-Weiss modificada  $\chi = C/(T-\Theta')$ , onde  $\Theta'$  seria dependente da fração de íons de ferro que estão interagindo em aglomerados [3].

[1] G. BLASSE, Philips Res. Reports, 18,383-392 (1963)

[2] V. M. TALANOV, Phys. Stat. Sol. (b) 106, 99 (1981)

[3] J. SPALEK, et al., Phys. Rev. B, 33,5,3407-3418 (1 Mar 1986)

(UFRJ, CNPq, FINEP).

## THE MAGNETIC PHASE TRANSITION IN Fe<sub>17</sub>Ho<sub>2</sub> SINGLE CRYSTAL

A.A.Coelho<sup>1,2</sup>, Ch.V.Mohan<sup>2</sup>, S.Gama<sup>1</sup> and H.Kronmüller<sup>2</sup>

<sup>1</sup>IFGW - Universidade Estadual de Campinas, C.P.6165, 13085-870 Campinas, SP, Brazil

<sup>2</sup>Max-Planck Institut für Metallforschung, Institut für Physik,  
Heisenbergst 1, D-70569 Stuttgart, Germany

The magnetic phase transition in Fe<sub>17</sub>Ho<sub>2</sub> single crystal is investigated from a magnetisation measurements performed in the vicinity of the Curie temperature ( $T_C$ ), where these system undergo a magnetic phase transition from a ferrimagnetic to a paramagnetic state. Well-defined phase transition is found to exist in these system. Values of the Curie temperature and the critical exponents corresponding to the spontaneous magnetisation ( $\beta$ ), initial susceptibility ( $\gamma'$ ,  $\gamma$ ) and the magnetisation isotherm at the Curie point ( $\delta$ ) are deduced from the analysis based on several methods: Modified Arrott plot, Kouvel-Fisher method, scaling plot and the  $\ln J$  vs.  $\ln(\mu_0 H)$  plots. A very good agreement has been observed between the exponents values obtained by various methods. The values of  $\beta$ ,  $\gamma$  and  $\delta$  are closed to those theoretically predicted for a three-dimensional Heisenberg ferromagnet.

## <sup>59</sup>Co NMR Study of the Intermetallic Compound SmCo<sub>2</sub>

I.S. Oliveira, E. Gratz\* and A.P. Guimarães

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro - 22290-180, Brazil

\* Technische Universität Wien, Institut für Experimentalphysik, Wiedner Hauptstrasse 8-10,  
A-1040 Wien, Austria

*Palavras-chave:* NMR, SmCo<sub>2</sub>

The binary intermetallic compounds RCo<sub>2</sub>, where R is a rare earth, shows a variety of interesting magnetic properties which can be studied by the NMR of <sup>59</sup>Co, a nuclear probe with abundance 100%, spin  $I = 7/2$  and electric quadrupole moment  $Q = 0.40 \times 10^{-28} m^2$ . The Laves phase SmCo<sub>2</sub> intermetallic compound orders ferrimagnetically below 259 K. Early studies have assigned its easy direction of magnetization to be along  $\langle 111 \rangle$ . Spin-echo NMR was applied to the study the <sup>59</sup>Co spectra in polycrystalline SmCo<sub>2</sub> at 4.2 K. The NMR spectrum shows two main lines centered approximately at 43 and 60 MHz, corresponding to two inequivalent magnetic sites, which we shall call site I (lower frequency) and site II (higher frequency). The line in site II splits into seven well resolved quadrupolar satellites with individual halfwidths of 0.7(2) MHz. These correspond to the seven allowed magnetic transitions for a spin  $I = 7/2$ . A linear fit through the positions of the satellites yields a quadrupolar splitting equal to  $\delta\nu_Q = 1.151(6)$  MHz with asymmetry parameter  $\eta = 0$ , corresponding to a  $V_{zz}$  of about  $1.15(1) \times 10^{21} Vm^{-2}$ . The first line shows a halfwidth of 1.5(8) MHz, about twice as large the individual linewidths of the satellites in the second line, and does not present resolved quadrupolar splitting. From these results we can put an upper limit of 0.2 MHz for the quadrupolar splitting in site I. This is the first case where well resolved quadrupolar satellites are observed in the NMR of the B-site in intermetallic compounds RB<sub>2</sub> in polycrystalline samples.

## MAGNETIC PROPERTIES OF FeV ALLOYS

J. C. Krause<sup>a\*</sup>, J. Schaf<sup>a</sup>, M. I. da Costa Jr.<sup>a</sup>, A. V. dos Santos<sup>a\*</sup> and C. Paduani<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Instituto de Física - UFRGS - RS, <sup>b</sup>Departamento de Física - UFSC - SC

*Palavras-Chave: FeV, Mössbauer, magnetic properties*

Local magnetic properties of binary alloys like iron-vanadium have been the subject of experimental and theoretical studies along the years. Substitutional Fe-V alloys can be formed through all the composition range, in disordered bcc  $\alpha$  and tetragonal  $\sigma$  phases. Atomic long range order solutions (ordered  $\alpha'$  phases) exist only near the stoichiometric composition of 50% Fe - 50% V. Through theoretical studies applying local spin density in LMTO-ASA<sup>1</sup>, we get a good description of the electronic structure and magnetic properties of ordered bcc alloys ( $\alpha'$ -FeV). DOS analyses predict a null magnetic moment on the Fe atom and zero hyperfine magnetic field on Fe nucleus. Calculation with DVM<sup>2</sup> method, in iron cluster with Vanadium impurity, predict that the vanadium atoms influence the neighboring Fe atoms. In order to get experimental support we have prepared stoichiometric and off-stoichiometric Fe-V alloys, by melting pure iron and vanadium in arc-furnace, and then quenched from 1,300°C. One 50 at. % sample was annealed at 610°C for one hour. The Mössbauer spectra of the stoichiometric samples provided hyperfine field distribution curves P(H) by using the histogram method of Hess and Rübartsch. The most probable hyperfine field for the as quenched sample is 148.5 kOe and for the annealed sample it is 10 kOe. A small peak in the P(H) spectrum, for  $H_{hyp}=0$ , is attributed to the ordered  $\alpha'$ -Fe-V clusters. The theoretical predictions are in good agreement with the experimental results and indicate that the magnetic moment of Fe depends on the V concentration and also on the cluster ordering.

(\*CNPq)

1 - C.A. Kuhnen and A.V. dos Santos, Sol. State Comm. 85, 3, 273 (1993).

2 - C. Paduani and J.C. Krause, J. Magn. Magn. Mat. 138, 109 (1994).

## SUSCETIBILIDADE MAGNÉTICA AC EM LIGAS $Gd_{1-x}La_x$ ( $x = 0, 15, 27,5$ e 50 at. %)

*Evaristo Nunes Filho, Jair Carlos Checon de Freitas e Carlos Larica*

Departamento de Física - Centro de Ciências Exatas - Universidade Federal do Espírito Santo

*Palavras-chave: gadolínio, lantânio, suscetibilidade magnética*

Os metais terras-raras apresentam grande afinidade para a formação de soluções sólidas entre si, com o surgimento de propriedades magnéticas peculiares. No caso da série Gd-La o Gd é ferromagnético, com estrutura hcp, enquanto o La, tipo dhcp e não magnético, apresenta raio atômico maior que o do Gd, levando assim à sequência de estruturas hcp, tipo Sm, dhcp e fcc com o aumento da concentração de La. Foram preparadas ligas  $Gd_{1-x}La_x$  com  $x = 0, 15, 27,5$  e 50 at. %, em formato de agulha, analisadas através de medidas de suscetibilidade magnética AC ( $\chi_{ac}$ ) e resistividade elétrica em função da temperatura. O Gd metálico ( $T_c = 293$  K) apresentou abaixo de 235 K um acréscimo em  $\chi_{ac}$ , atribuído ao desvio do eixo fácil de magnetização com relação ao eixo  $c$ . A aplicação de campos magnéticos DC longitudinais provocou uma diminuição nos valores de  $\chi_{ac}$ , com o surgimento de novo máximo em torno de 240 K. A liga  $Gd_{83}La_{17}$  (hcp) apresentou comportamento magnético similar ao Gd metálico, com  $T_c = 225$  K e máximo em torno de 15 K, também associado à reorientação dos momentos magnéticos. A liga  $Gd_{72,5}La_{27,5}$  (tipo Sm) revelou dois picos antiferromagnéticos em 131 K e 112 K, extremamente sensíveis a campos DC, atribuídos ao surgimento independente de ordem magnética nos sítios com simetria hexagonal e cúbica respectivamente da estrutura tipo Sm. Medidas de resistividade elétrica indicaram um ordenamento magnético helicoidal, analogamente ao que ocorre em ligas Gd-Y e Gd-Sc. A liga  $Gd_{30}La_{70}$  (dhcp) apresentou apenas um máximo bastante alargado em  $\chi_{ac}$  na temperatura de 30 K, num comportamento que, associado a medidas de resistividade elétrica, indicou a possibilidade de um ordenamento do tipo vidro de spins. Dessa forma, a diluição de La em Gd favorece o surgimento de ordem antiferromagnética em detrimento do ferromagnetismo observado no Gd puro e em ligas concentradas em Gd. A presença do La possui o efeito de reduzir o alcance da interação RKKY, responsável pelo magnetismo localizado nos terras-raras, além de produzir distorções na rede cristalina, num processo análogo ao observado em medidas com Gd submetido a altas pressões.

(CNPq, FINEP)

## CAMPO HIPERFINO MAGNÉTICO NAS LIGAS DE HEUSLER



*Willi Pendl Junior<sup>1</sup>, Artur Wilson Carbonari, Rajendra Narain Saxena,  
José Mestnik Filho e Jacob Schaf<sup>2</sup>*

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares IPEN-CNEN/SP

<sup>1</sup> Universidade Cidade de São Paulo - UNICID

<sup>2</sup> Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS

**Palavras-chave:** ligas de heusler, campo hiperfino magnético, correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada

Foram medidos os campos hiperfinos magnéticos (CHM) no <sup>181</sup>Ta no sítio do elemento de transição não magnético das ligas de Heusler  $\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{Al}$ ,  $\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Nb}_x\text{Al}$ ,  $\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{Sn}$  e  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  com  $0 < x < 1$ , pela técnica de correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada diferencial em tempo, utilizando-se a bem conhecida cascata gama 133-482 keV do <sup>181</sup>Ta a partir do decaimento do <sup>181</sup>Hf. As amostras foram preparadas por fusão em forno de arco dos componentes metálicos em atmosfera de argônio com ~0,1% de átomos Y substituídos por <sup>181</sup>Hf radioativo. As medidas foram realizadas em um espectrômetro automático com dois detectores de BaF<sub>2</sub>, na temperatura de 77 K. Os resultados de CHM sobre o Ta no sítio do elemento de transição não magnético são dados abaixo. A medida de magnetização de saturação e temperatura de Curie de cada liga foi feita utilizando magnetômetro de amostra vibrante. A principal conclusão é que o valor do CHM no <sup>181</sup>Ta no sítio Y depende principalmente da natureza química do elemento de transição não magnético do que qualquer outro fator, como momento magnético local da liga, parâmetro de rede, etc.

Liga	x=0,2	x=0,4	x=0,6	x=0,8
$\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{Al}$	-340(11)	-260(9)	-254(10)	-225(6)
$\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Nb}_x\text{Al}$	-393(14)	-299(12)	-253(6)	-220(4)
$\text{Co}_2\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{Sn}$	-239(12)	-196(15)	-217(8)	-238(5)
$\text{Co}_2\text{V}_x\text{Cr}_{1-x}\text{Al}$	-193(9)	-154(3)	-138(4)	-103(7)

## TRANSIÇÃO DE FASE MAGNÉTICA NO $\text{TmFe}_3$

*João Batista Marimon da Cunha e Carlos Schroeder*

Instituto de Física - UFRGS - Caixa Postal 15051 91501-970 Porto alegre - RS

**Palavras-Chave:** Espectroscopia Mössbauer, reorientação de spin, compostos intermetálicos

Foram realizadas medidas de espectroscopia Mössbauer no <sup>57</sup>Fe entre 80 e 300 K no composto intermetálico  $\text{TmFe}_3$ . Nos compostos intermetálicos de terras-raras (R) com metal de transição 3d (M) a direção de fácil magnetização é determinada pela competição entre a anisotropia da subrede R e anisotropia da subrede 3d ou mesmo entre as anisotropias dos vários sítios de R. Como no caso do  $\text{ErFe}_3$  (1), medidas de magnetostrição no  $\text{TmFe}_3$  sugerem uma reorientação de spin do plano basal para o eixo C (ou muito próximo). Nestes compostos o Fe ocupa 3 sítios cristalográficos (estrutura romboédrica, R3m, sítios 3b, 6c e 18h). O sítio h pode desdobrar-se em h1, h2 e h3, na razão 6:6:6, não equivalentes magneticamente, dependendo da direção da magnetização em relação ao eixo C. Quando a magnetização é ao longo do eixo C, estes tres sítios são equivalentes magneticamente. Portanto a espectroscopia Mössbauer pode detectar mudanças na direção de fácil magnetização pelo desdobramento do subespectro correspondente a este sítio. Nossas medidas no  $\text{TmFe}_3$  indicam que uma rotação de spin do plano basal para o eixo C ocorre em torno de 200 K. Esta transição é discutida em termos das anisotropias de campo cristalino dos sítios de R e da anisotropia da subrede 3d.

Referências:

1-J. G. Bowden and R. K. Day, J. Phys. F;Metal Phys. 7 (1977) 181

2-R. Abbund et al. JMMM 15-18 (1980) 595.

(CNPq, FAPERGS)

## PREPARAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE VIDROS DE SPIN $Fe_{1-x}Mn_xPd_3$

Gabriel Simon e Carlos Alberto dos Santos

Instituto de Física - UFRGS

*Palavras-Chave:* Vidros de spin, susceptibilidade magnética, espectroscopia mössbauer

Ligas de Pd e Pt com elementos 3d, principalmente Fe, Co e Mn, vêm despertando interesse científico e tecnológico há mais de duas décadas. Entre as diversas propriedades apresentadas por esses materiais, destacamos seu comportamento de vidro de spin, cujo interesse vem aumentando em função da possibilidade de novos testes dos modelos estabelecidos, no que se refere ao comportamento crítico em baixas dimensões. Ligas do tipo  $Fe_{1-x}Mn_xPd_3$  são interessantes porque apresentam uma oportunidade única de abordar o problema da influência do ambiente local sobre as propriedades magnéticas de estruturas do tipo  $L1_2$  ( $FePd_3$ ) e  $DO_{23}$  ( $MnPd_3$ ). Embora esse material seja bem menos difundido do que seu isomorfo  $Fe_{1-x}Mn_xPt_3$ , algumas das suas propriedades magnéticas, quando na forma massiva, são razoavelmente bem conhecidas. Sabe-se, por exemplo, que o sistema apresenta comportamento de vidro de spin para valores de  $x$  entre 0.3 e 0.8, com  $T_f < 100$  K. Todavia, o sistema carece de uma investigação sistemática, com uma abordagem multitécnica. Não é do nosso conhecimento, por exemplo, qualquer estudo Mössbauer, uma técnica capaz de fornecer informações microscópicas valiosas. Objetivando investigar em que medida as propriedades magnéticas de amostras massivas são reproduzidas quando o material encontra-se sob a forma de filmes finos, preparamos amostras massivas na faixa de concentração de vidros de spin, cujos resultados preliminares serão discutidos na presente comunicação. Quantidades apropriadas de Pd, Fe e Mn foram misturadas e fundidas em forno a arco, em atmosfera de argônio. Na sequência as amostras foram homogeneizadas em vácuo, a uma temperatura de 1300 K, durante 48 horas, lentamente resfriadas até 700 K. Nessa temperatura as amostras permaneceram durante 5 dias. Difração de raios X indica razoável grau de ordenamento em todas as amostras preparadas. Medida de susceptibilidade magnética na amostra com  $x=0.7$  indica claramente histerese termomagnética abaixo de 50 K, sugerindo comportamento de vidro de spin. Resultados preliminares de espectroscopia Mössbauer para a amostra com  $x=0.8$  sugerem mecanismo de relaxação magnética.

(CNPq, CAPES, FINEP, FAPERGS)

## PROPRIEDADES MAGNÉTICAS E CALOR ESPECÍFICO DO COMPOSTO $Ag_2TbIn$

Gilberto L. F. Fraga<sup>(a)</sup>, Denys Schmitt<sup>(b)</sup>, Rose Marie Galera<sup>(b)</sup> e Damien Gignoux<sup>(b)</sup>

<sup>(a)</sup>Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, Brasil.

<sup>(b)</sup>Laboratoire Louis Neel, CNRS, Grenoble, France.

*Palavras-Chave:* antiferromagnetismo, transição de fase, terra rara.

Os intermetálicos Heusler formam uma grande família de compostos cúbicos, na sua maioria magnéticos, com composição estequiométrica  $X_2YZ$ . Nestes compostos, geralmente Y é o elemento magnético, formando uma super-rede *fcc*. Considerando-se somente interações de troca antiferromagnéticas com primeiros vizinhos, uma rede deste tipo forma um sistema magnético frustrado. A estabilização da estrutura magnética, neste caso, é ditada pelas interações de troca com os segundos e demais vizinhos mais próximos, tornando estes sistemas interessantes para o estudo dos efeitos da concentração de elétrons, e ordem atômica, na estabilidade de estruturas magnéticas. Estudos anteriores por difração de neutrons, em uma amostra policristalina de  $TbAg_2In$  sugeriram a existência de estruturas antiferromagnéticas complexas em baixas temperaturas. Com o objetivo de melhor estudar as suas propriedades magnéticas, confeccionamos uma amostra monocristalina deste composto. As medidas de magnetização foram realizadas entre 1,5 K e 300 K, e mostraram um pequeno efeito anisotrópico para campos magnéticos superiores a 6 Tesla, onde a direção (100) torna-se de fácil magnetização. A dependência térmica do inverso da susceptibilidade paramagnética apresentou um comportamento linear, obedecendo uma Lei de Curie-Weiss. O momento magnético efetivo, e a temperatura paramagnética de Curie são:  $\mu_{eff} = 9,89 \mu_B/Tb$  e  $\theta_p = 35$  K, respectivamente. O calor específico foi medido entre 1 K e 40 K utilizando-se a técnica AC. A curva do calor específico da amostra monocristalina apresenta uma transição tipo- $\lambda$  em  $T_N=6,8$  K, enquanto a amostra policristalina apresenta uma anomalia a 6 K, e uma temperatura de transição  $T_N=8,2$  K. A entropia magnética foi determinada integrando-se  $C_{mag} / T$  em função da temperatura. A entropia assim determinada alcança  $20,6 J/K.mol \cong R \ln(13)$  a 30 K, em total concordância com o comportamento do Tb ( $J=6$ ). No composto  $Ag_2TbIn$ , assim como em outros compostos Heusler, a estrutura magnética é fortemente influenciada pela desordem química entre os elementos Y e Z. Isto poderia explicar as diferenças nos resultados de calor específico das amostras mono e policristalina. (CNPq)

## Magnetic Properties of TM-Co-Fe-Ti Spinel Oxides

B. Giordanengo\*, M.A.C. de Melo, T.Moyo\*\*, A. Takeushi, P.R.J. Silva,  
H.Saitovitch\*, and Elisa Baggio-Saitovitch\*

\*Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, Brazil

\*\*Department of Physics, University of Natal, Durban South Africa

**Key-words:** spin-glass, magnetic clusters, Mössbauer

Spin glass like behaviour has been recently observed in a ceramic  $Zn_{0.5}Co_{0.9}Fe_{1.2}Ti_{0.4}O_4$  spinel oxide (J. Phys.: Condens. Matter 7 (1995) 8183) This motivated our interest to investigate how the spin glass like behaviour of magnetic clusters in diamagnetic matrix correlates to that of non-magnetic or weakly magnetic clusters in ferromagnetic matrix. PAC, AC susceptibility, field cooled and zero field cooled magnetizations, hysteresis loops and Mössbauer effect have been measured for  $TM_{0.5-x}Co_{0.9}Fe_{1.2+x}Ti_{0.4}O_4$  ( $x=0.0$  and  $0.2$ ) spinel oxide where TM = Zn and Cu. The variation of coercive field with temperature has been found to fit a double exponential function form  $H_c(T) = H_1e^{-\beta_1 T} + H_2e^{-\beta_2 T}$  where  $H_i$  and  $\beta_i$  are constants for the sample with  $x=0.0$  and TM=Zn. The exponential increase in coercive field can be linked to increased effective cluster volume with temperature. The double exponential fit to coercive field data suggests two types of clusters arising from ions occupying A and B sites with Fe on both sites. This is in agreement with the Mössbauer measurements which show superparamagnetic fluctuations.

AC susceptibility and Mössbauer spectra show For  $Zn_{0.5}Co_{0.9}Fe_{1.2}Ti_{0.4}O_4$  that the spin glass transition temperature is about 270K, while with increase in the iron concentration ( $Zn_{0.3}Co_{0.9}Fe_{1.4}Ti_{0.4}O_4$ ) increase the spin glass transition temperature (about 320K) Room temperature PAC measurements on  $HfO_2$  doped samples of Zn showed different interaction frequencies, with magnetic components in the Fe enriched case. Different behaviour is observed in the sample with Cu for which the ordering temperature is about 480K.

(CNPq/TWAS)

## STABILITY OF THE LONG-RANGE ANTIFERROMAGNETIC ORDER IN THE DILUTED ANTIFERROMAGNET $Fe_xZn_{1-x}F_2$ UNDER STRONG RANDOM FIELDS

F.C. Montenegro and K.A. Lima

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife, Brazil

M. S. Torikachvili

<sup>2</sup>Department of Physics, San Diego State University  
San Diego, California 92182-2222

A. Lacerda

<sup>3</sup>National High Magnetic Field Laboratory Mail Stop E536,  
Los Alamos NM8745, USA

*Palavras-Chaves:* Relaxation; random fields; spin glasses.

The short-ranged (insulating) diluted antiferromagnet (DAF)  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  has been considered an experimental realization of the Random-Exchange Ising Model (REIM) in the absence of external fields ( $H=0$ ). The application of a uniform field collinear with the axis of spontaneous order induces a crossover from REIM to Random-Field Ising Model (RFIM) critical behavior. In the latter regime the antiferromagnetic long-range order (AF LRO) is stable against the presence of random fields of arbitrarily small magnitudes. Here, we study the stability of the AF configuration in samples of  $Fe_xZn_{1-x}F_2$  with  $x = 0.41, 0.56$  and  $0.6$  by investigating time-dependences of the magnetization ( $M$ ) in a large region of the ( $H, T$ ) diagram. In DAF compounds, AF LRO is established by zero-field-cooling (ZFC) samples from the paramagnetic phase. If  $H$  is subsequently increased, relaxation of the magnetization ( $M$ ) is observed to occur for all measured samples whenever the magnitude of  $H$  exceed a limit which depend on  $T$  and  $x$ . In this strong random-field regime, the AF configuration is no longer the ground state of the system and a glassy phase is nucleated in the upper part of the ( $H, T$ ) phase diagram.

Work partially supported by CNPq, CAPES, FINEP and FACEPE

**GRIFFITHS PHASE IN THE DILUTED ISING ANTIFERROMAGNET**  
 **$\text{Fe}_{0.42}\text{Zn}_{0.58}\text{F}_2$**

*A. Rosales -Rivera, F.C. Montenegro, J.M.C. Ferreira and J.A. Aguiar*  
*Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco*  
*50670-901 Recife-PE, Brasil*

**Keywords:** random fields; Ising models; random magnets.

A study of the Griffiths-Type Pseudocriticality in the Random Field Ising Model (RFIM) system  $\text{Fe}_{0.42}\text{Zn}_{0.58}\text{F}_2$  has been performed by dc magnetization (M) and parallel ac susceptibility ( $\chi_{ac}$ ) measurements, using a superconducting quantum interference device (SQUID) magnetometer. A splitting of the low-field  $\chi_{ac}$  peak into a narrow critical peak at  $T_c(H)$  and a broad field-induced Griffiths phase shoulder peaking arising at  $T_p > T_c$  as H increases has been recently observed by Binek et al [1]. In this work, we have mapped the positions of  $T_c(H)$  and  $T_p(H)$  in a (H,T) phase diagram for  $0 < H < 5$  T. A comparison between M and  $\chi_{ac}$  data for several frequencies yields to a dynamical evolution of both  $T_c$  and  $T_p$  lines. Based on the obtained data we show that the appearing of the broad field-induced Griffiths peak at  $T_p(H)$  is strongly coupled to the nucleation of a spin-glass-like phase by intense random fields in this compound.

[1] -Binek , Ch. Kuttler S., and Kleeman W. , Phys. Rev. Lett. 75, 2412 (1995).

This work is supported by FINEP,CNPq,CAPES,FACEPE (Brazilian Agencies) and COLCIENCIAS (Columbian Agency).

**RAMAN, MAGNETIZATION AND MICROWAVE ABSORPTION STUDIES IN**  
 **$\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  (R=La,Pr; A=Ca,Sr,Pb)**

*E. Granado, P.G. Pagliuso, A.D. Alvarenga, A. Martin, J.A. Sanjurjo, C. Rettori,*  
*G.E. Barberis and I. Torriani*

*Instituto de Física, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil*

*S. Oseroff*

*San Diego State University, San Diego, California, USA*

*M. Insausti, T. Rojo*

*Departamento de Química Inorgánica, Univesidad del País Vasco, Bilbao, España*

**Palavras-Chave:** magnetoresistance, perovskite, Raman scattering

In this work we study polycrystalline and monocrystalline samples of  $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  (R=La,Pr; A=Ca,Sr,Pb) by means of Raman scattering, magnetization and microwave absorption experiments as a function of temperature. The different crystal structures were characterized by room-temperature X-ray measurements. The  $\text{A}_{1-x}\text{B}_x\text{MnO}_3$  system has attracted renewed interest because of the colossal magnetoresistance exhibited for some specific compounds. The mechanism responsible for this effect is not well established, since a recent calculation indicated that the Double Exchange model alone cannot explain resistivity and magnetoresistance effects quantitatively. It was proposed that, in addition to Double Exchange mechanism, a strong electron-phonon interaction arises from the Jahn-Teller splitting of the outer Mn d level near the Curie temperature. For pseudo-cubic samples, the temperature dependence of one of the Raman peaks shows an anomaly near the magnetic phase transition. We associate this peak to a vibration at Mn-O octahedra, which become Raman active due to local distortions of the cubic perovskite structure. Moreover, the anisotropy found on single-crystal magnetization curves supplies another strong evidence of the existence of these distortions. We speculate that the origin of the local distortions is related to the Jahn-Teller effect at the Mn site, which, in addition, can have a fundamental role in the giant magnetoresistance mechanism.

## FRUSTRAÇÃO DE SPINS NO ÓXIDO DELAFOSSITE $\text{CuFeO}_2$

Roberta Nunes Attili<sup>1</sup>, Michael Uhrmacher<sup>2</sup>, Klaus-Peter Lieb<sup>2</sup>, Mamoru Mekata<sup>3</sup> e Klaus Winzer<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

<sup>2</sup> II. Physikalisches Institut, Universität Göttingen, Germany

<sup>3</sup> Department of Applied Physics, Fukui University, Japan

<sup>4</sup> I. Physikalisches Institut, Universität Göttingen, Germany

**Palavras-Chave:** Correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada, Frustração de spins, Redes triangulares

As interações hiperfinas no sítio do  $^{111}\text{Cd}$  foram medidas para o composto  $\text{CuFeO}_2$  via correlação angular  $\gamma$ - $\gamma$  perturbada (CAP) no intervalo 4,2-1073 K. Devido à própria estrutura cristalina desta família de óxidos, o composto antiferromagnético  $\text{CuFeO}_2$  ( $T_{N1}=16$  K,  $T_{N2}=11$  K)<sup>(1)</sup> apresenta um interessante comportamento magnético, o qual nunca foi estudado anteriormente via CAP. Nesta estrutura os íons magnéticos formam planos bidimensionais com redes triangulares, onde os spins são altamente frustrados abaixo das respectivas temperaturas de Néel. A 4,2 K a ponta de prova  $^{111}\text{In}(\text{EC})^{111}\text{Cd}$  implantada ionicamente na amostra sente a interação de um gradiente de campo elétrico ( $T_m=295$  K;  $\nu_Q=125(1)$  MHz,  $\eta=0$ ) combinado com um fraco campo magnético (0,3(1) T) quando comparado aos campos medidos em outros óxidos ferro- ou antiferromagnéticos não frustrados. Medidas de espectroscopia Mössbauer mostram um campo magnético interno de 51,7 T<sup>(1)</sup> para este material. Uma explicação simples para o nosso resultado é proposta para a ponta de prova de CAP, que substitui os íons magnéticos  $\text{Fe}^{3+}$  na estrutura cristalina. Devido à impureza não apresentar momento magnético uma mudança local na rede triangular ocorre, levando ao cancelamento dos spins localizados na primeira vizinhança à ponta de prova, removendo, assim, a frustração. O fraco campo magnético observado parece ser devido à interações da ponta de prova com segundos vizinhos localizados no mesmo plano e/ou planos adjacentes na estrutura. Comportamento similar foi observado para outros dois compostos ( $\text{AgCrO}_2$  e  $\text{CuCrO}_2$ ) da família Delafossite.

(CNPq, FAPESP e Deutsche Forschungsgemeinschaft)

<sup>(1)</sup>M.Mekata et al., J.Phys.Soc.Japan 62(1993)4474

## ESTUDOS DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DA SÉRIE DE $\text{CeFe}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)_2$ .

G. H. Wolf, M. B. Fontes, S. L. Bud'ko, Z. Zeng e E. M. Baggio-Saitovitch

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud 150 - Urca - 22290-180  
Rio de Janeiro - R.J.

**Palavras-Chave:** Intermetálicos, Magnetismo, Espectroscopia Mössbauer

A família de compostos intermetálicos com fórmula química  $\text{RE}_2\text{T}_2\text{X}_2$  ( $\text{RE}$ =terra rara,  $\text{T}$ =metal de transição,  $\text{X}=\text{Si}, \text{Ge}$ ) é muito numerosa e possui propriedades físicas variadas e interessantes, haja visto a grande quantidade de dados experimentais e teóricos disponíveis na literatura. Os sistemas contendo  $\text{RE}=\text{Ce}$  exibem propriedades únicas, principalmente associadas à instabilidade do nível 4f do Ce. Medidas de XAFS mostram a existência de correlações entre a valência do Ce e a intensidade da superposição dos orbitais do Ce e do Si (Ge) quando T é um elemento de transição 3d ou 4d. A mistura dos estados 4f com os estados da banda de condução podem produzir vários fenômenos como a supercondutividade do sistema férmion pesado de  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ . A pesquisa de soluções sólidas entre vários sistemas ternários de  $\text{CeT}_2\text{X}_2$  fornece informações interessantes sobre o estado magnético dos átomos de Ce. Na série de  $\text{Ce}(\text{Ru}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{Ge}_2$  a evolução do estado ferromagnético do  $\text{CeRu}_2\text{Ge}_2$  para o estado férmion pesado (HF) do  $\text{CeFe}_2\text{Ge}_2$  em função de  $x$ -Fe foi estudada através de várias técnicas<sup>1</sup>. O  $\text{CeFe}_2\text{Si}_2$  é conhecido ser um sistema de valência intermediária (VI), com valência do Ce ~3,26 à 4,2K e ~3,2 à 300K. Neste trabalho apresentamos um estudo da evolução do estado HF do  $\text{CeFe}_2\text{Ge}_2$  para o estado de valência intermediária do  $\text{CeFe}_2\text{Si}_2$  pelo estudo da série de  $\text{CeFe}_2(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)_2$  através da espectroscopia Mössbauer, medidas de resistividade elétrica *dc* e magnetização. As amostras foram preparadas. Os espectros Mössbauer a 300K são idênticos aos obtidos a 4,2K, e seus ajustes foram feitos considerando as cinco possíveis configurações de primeiros vizinhos do Fe. Apesar do deslocamento central (CS) não apresentar nenhuma mudança de comportamento em função da concentração, as curvas de resistividade, acima de 100K, mostram um claro efeito que pode ser atribuído a mudança do estado de valência do Ce.

<sup>1</sup> M.B.Fontes et al.; Phys. Rev.B (1996) a ser publicado.

(CBPF/CNPq)

## OBTENÇÃO DO NÍVEL DE FERMÍ DO $\text{ErCo}_2$ TROCANDO Co POR Ni-Fe

H. Santos, M.R. Soares, F. Garcia, A.Y. Takeuchi e S. F. da Cunha  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - RJ

*Palavras-Chave:* nível de Fermi,  $\text{ErCo}_2$ , transição de fase

Nos compostos  $\text{RCo}_2$  comportamentos anômalos são observados, como por exemplo, saturação na curva de resistividade e transição de fase de primeira ordem. Estes comportamentos têm origem no fato do nível de Fermi destes compostos estar numa posição intermediária na curva de densidade de estados, entre a dos de  $\text{RNi}_2$  (baixa densidade) e a dos de  $\text{RFe}_2$  (alta densidade) e, além disso, numa região de inclinação acentuada desta curva. Para verificar tal fato estudou-se a mudança do comportamento magnético e de transporte elétrico em função da posição do nível de Fermi. Foram fabricadas amostras das séries  $\text{Er}(\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_{0.3x}\text{Fe}_{0.7x})_2$  e  $\text{Er}(\text{Co}_{1-y}\text{Ni}_y)_2$ , com  $x = 0.20$  e  $0.10$  e  $y = 0.00, 0.05, 0.10, 0.20, 0.40, 0.60, 0.80$  e  $1.00$ , contendo a primeira série proporções de Fe e Ni estimadas com a finalidade de reconstituir o nível de Fermi do composto  $\text{ErCo}_2$ . A outra série foi feita com o objetivo de observar o comportamento das propriedades elétricas e magnéticas em função da densidade de estados no nível de Fermi. Foram feitas medidas de resistividade elétrica, magnetização e suscetibilidade magnética. Foi observado nas amostras da série  $\text{Er}(\text{Co}_{1-y}\text{Ni}_y)_2$  com  $y \geq 0.10$  um comportamento qualitativamente igual ao dos compostos  $\text{RNi}_2$  e nas demais amostras, um análogo ao do  $\text{ErCo}_2$ . Na outra série, a presença do Fe anulou o comportamento que era esperado para a concentração de  $x=0.20$ , isto é, apesar da amostra de  $\text{Er}(\text{Co}_{0.80}\text{Ni}_{0.20})$  possuir transição de fase de segunda ordem como o composto  $\text{ErNi}_2$ , a curva de resistividade da amostra  $\text{Er}(\text{Co}_{0.80}\text{Ni}_{0.05}\text{Fe}_{0.14})_2$  mostra forte tendência de transição de fase de primeira ordem como  $\text{ErCo}_2$ . Conseguiu-se, então, reproduzir o comportamento dos compostos  $\text{RCo}_2$ , ou seja, o valor alto da resistividade a 300K, saturação da resistividade e grande anomalia em  $T_C$  a qual indica uma transição de primeira ordem. A partir disso, concluiu-se que a posição do nível de Fermi dos compostos  $\text{RCo}_2$  é responsável pelo comportamento que estes compostos apresentam.

## ESTUDO DO ORDENAMENTO DOS MOMENTOS MAGNÉTICOS NA HEMATITA ATRAVÉS DA DIFRAÇÃO DE NÊUTRONS

José Mestnik Filho, Maurício Moralles  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo

*Palavras-Chave:* estrutura magnética, difração de nêutrons, hematita

Foram realizadas medidas de difração de nêutrons em uma amostra de hematita ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) empregando-se um espectrômetro de três eixos instalado junto ao reator de pesquisas IEA-R1 do IPEN. O feixe de nêutrons incidente na amostra tem comprimento de onda de 1,4387 angstroms obtido com um monocromador de Cu [111]. As medidas foram realizadas com aproximadamente 30 g de hematita em pó com pureza superior a 99,5% à temperatura ambiente, acondicionadas em um porta-amostra cilíndrico de alumínio. A movimentação do espectrômetro e a aquisição dos dados foi feita de maneira automática, controlada por microcomputador. O tempo de aquisição para o intervalo de ângulos entre  $5^\circ$  e  $90^\circ$ , com passo angular de  $0,1^\circ$ , foi de aproximadamente 60 h. A resolução angular (FWHM) foi de  $1^\circ$ . Utilizando-se o programa de refinamento GSAS, o qual emprega o método de Rietveld, e supondo-se um alinhamento antiparalelo dos momentos magnéticos dos íons  $\text{Fe}^{3+}$  em planos consecutivos na direção 111 da estrutura do grupo espacial  $R\bar{3}c$ , observou-se que o espectro de difração não é reproduzido de maneira satisfatória. Suspeita-se que esta discrepância esteja relacionada com o fato bem conhecido na literatura de que este composto apresenta um ferromagnetismo fraco<sup>(1)</sup> acima da temperatura de Morin (260 K), apesar da predominância do antiferromagnetismo. No modelamento para levar em conta este efeito, duas hipóteses são testadas: ou o composto apresenta duas fases magnéticas coexistentes ou o alinhamento dos momentos magnéticos não é perfeitamente antiparalelo.

(1) K. Asai et al., Phys. Rev. B 41 (1990) 6124.

## CINÉTICA DE RECRISTALIZAÇÃO DA LIGA Al-Zn-Mg

*Carlos Roberto Sobreira Beatrice, Mario Cilense, Antonio Talarico Adorno e Waldir Gárlipp*  
Departamento de Físico-Química-Instituto de Química de Araraquara-UNESP

*Palavras Chave:* recristalização, energia de ativação, ligas de alumínio

A liga Al-Zn-Mg com adições de elementos como o Cu, Cr ou Zr tem importância prática na fabricação de estruturas leves, devido a resistência mecânica, resistência à corrosão sob tensão e boas condições de soldabilidade. Com a adição desses elementos visa-se o controle da densidade dos defeitos de vacância pela formação de complexos. No presente trabalho a energia de ativação de recristalização de grãos cristalinos nas ligas Al-5,03%Zn-1,67%Mg-0,23%Cu e Al-4,98%Zn-1,65%Mg-0,24%Cu-0,14%Cr, com 60% e 90% de taxa de deformação a frio, foi obtida por meio de medidas de difração de raios-X, microdureza e metalografia. As curvas de recristalização isotérmica são da forma sigmoide, característica de um processo de nucleação e de crescimento e pode ser expressa em termos da equação de Avrami. O surgimento de núcleos é verificado pelo aparecimento de cristalitos, obtidos por meio de difração de raios-X (técnica de 'back reflection') e por uma acentuada diminuição na dureza das amostras. Os valores da energia de ativação para a movimentação dos contornos de grão no processo de recristalização destas ligas, para 90% de deformação, foram  $(83 \pm 4)$  kJ/mol no caso da adição de Cu e de  $(9,6 \pm 0,5)$  kJ/mol na adição de Cu + Cr. O valor inferior para a liga contendo Cr, deve-se provavelmente ao fato dos complexos de Cr liberarem vacâncias num tempo inferior a 15 minutos durante o tratamento de recozimento. Isto promove intensa nucleação que favorece o refino de grão, barrando também a movimentação dos contornos de grão e a formação de uma recristalização secundária, pelo impedimento do movimento das discordâncias. Os resultados das energias de ativação de nucleação determinados pelos métodos de difração de raios-X e dureza são concordantes. Porém não se explica o valor mais elevado da energia de ativação para as ligas com 90% de deformação a frio senão considerar que tipo de barreira se interpõe a este crescimento.

(CNPq e FAPESP)

## ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE ADIÇÕES DE PRATA NAS TRANSFORMAÇÕES MARTENSÍTICAS DA LIGA Cu-12,86%Al

*Gilberto José de Arruda, Antonio Talarico Adorno,  
Assis Vicente Benedetti, Carlos Roberto Sobreira Beatrice*

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química-UNESP, Araraquara-SP

*Palavras-Chave:* transformações martensíticas, adições de prata, ligas a base de cobre

A liga Cu-Al apresenta uma região eutetóide entre 9,4 e 16 %Al. Acima da temperatura crítica, uma única fase bcc desordenada é estável nessa região e se decompõe, sob condições de equilíbrio, em duas outras fases que, na composição eutetóide, desenvolvem uma estrutura perlítica lamelar, semelhante àquela encontrada nos aços. Quando esta liga é submetida a têmpera a partir da região monofásica, são suprimidos os processos difusionais necessários para a formação das fases em equilíbrio e a liga apresenta então a formação de uma fase martensítica, cuja estrutura depende do teor de alumínio. Durante o aquecimento da liga no estado martensítico, a mesma passa por diversas transformações intermediárias, até atingir o estado final desordenado. Neste trabalho, estudou-se a influência de adições de 2, 4, 6, 8 e 10% de prata, em massa, nas transformações que ocorrem na liga Cu-12,86%Al, quando aquecida a partir do estado martensítico, utilizando-se calorimetria exploratória diferencial, difração de raios-X e microscopia eletrônica de varredura. Os resultados obtidos indicaram que a presença da prata altera de forma significativa as transições metaestáveis observadas na liga Cu-12,86%Al, suprimindo algumas transformações intermediárias e modificando o intervalo de temperaturas onde ocorre a formação da fase final desordenada.

(FAPESP - CNPq)

## TEMPERATURA LIMITE PARA FORMAÇÃO DA ZONA DE GUINIER PRESTON EM LIGAS DE Al-Zn-Mg

*Célio dos Santos Lourenço e Mário Cilense*

Departamento de Físico-Química - Instituto de Química de Araraquara - UNESP

*Palavras-Chave:* ligas metálicas, resistividade, zonas de G.P.

Na tentativa de contribuir na ampliação do conhecimento e na verificação de algumas propriedades da liga Al-Zn-Mg com adição de Cu e Cr, procuramos neste trabalho estudar esta liga no tocante à formação das zonas de G.P.. Sabe-se que o comportamento do endurecimento está relacionado com a estabilidade das zonas de G.P. a qual aumenta proporcionalmente com a temperatura de envelhecimento. As amostras para as medidas de resistividade foram recozidas, dobradas em forma de U, homogeneizadas a 470°C por uma hora e temperadas por dois processos: na água a 0°C e diretamente, em óleo de silicone, na temperatura de envelhecimento. As alterações sofridas pelas ligas no tratamento de solubilização e precipitação foram acompanhadas isotermicamente pelas medidas de resistividade das amostras em função do tempo de envelhecimento. As curvas da variação da resistividade foram obtidas através de microcomputador com um programa por nós desenvolvido, o qual fornecia também o tempo para que cada curva atingisse -8% de variação da resistividade (método do seccionamento transversal). Com esses tempos e as temperaturas de envelhecimento de cada amostra, construiu-se o diagrama TTT (curvas C). No presente trabalho, as ligas L (contendo Crômio) e H (sem Crômio) foram submetidas ao mesmo tratamento técnico em cada série de medidas. No entanto, uma rápida comparação entre as curvas de variação da resistividade com o tempo de envelhecimento para as ligas temperadas na água, já nos permite constatar a influência do Crômio diminuindo a porcentagem de variação da resistividade. Analisando os diagramas TTT pudemos concluir que a temperatura limite para formação da zona de G.P. nessas ligas é de  $(125 \pm 2)^\circ\text{C}$ .

## MEDIDAS DE ATRITO INTERNO EM LIGAS DE Nb-0.3% p Ti CONTENDO OXIGÊNIO

*Luiz Eduardo da Costa Ferreira<sup>1</sup>, Carlos Roberto Grandini<sup>1</sup>, Hugo Sandin<sup>2</sup> e Odila Florêncio<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP - Câmpus de Bauru

<sup>2</sup> Centro de Engenharia de Materiais, FAENQUIL

<sup>3</sup> Departamento de Física, UFSCar

*Palavras-Chave:* anelasticidade, atrito interno, ligas de nb-ti

Desde os anos quarenta, as medidas de atrito interno tem sido usadas como uma rica fonte de informação a respeito de possíveis alterações provocadas nas propriedades mecânicas de metais e ligas metálicas, devido a presença de elementos intersticiais em solução sólida. Neste trabalho, foram efetuadas medidas de atrito interno como função da temperatura em ligas de Nb-Ti, dopadas com várias quantidades de oxigênio dissolvido em solução sólida na matriz metálica. As amostras constituem policristais da liga Nb-Ti, contendo 0.3 % em peso de Ti, produzidas através da técnica da metalurgia do pó, no Centro de Engenharia de Materiais da Faculdade de Engenharia Química de Lorena (SP). Estas amostras foram dopadas com várias quantidades de oxigênio em solução sólida (0.04 a 0.08 % em peso). As medidas de atrito interno foram obtidas através da técnica do pêndulo de torção invertido, num intervalo de temperatura compreendido entre 300 e 700 K, operando com frequência em torno de 1.0 Hz. A deformação máxima sofrida pela amostra não ultrapassou  $10^{-5}$ . Os dados de atrito interno foram obtidos automaticamente via microcomputador através do decaimento das oscilações livres do pêndulo. Os resultados mostram espectros complexos que foram analisados em termos de seus picos de Debye constituintes. Foram identificados processos de relaxação devido à reorientação induzida por tensão de átomos de oxigênio em torno de átomos de nióbio e titânio da matriz metálica (processos Nb-O e Ti-O) e, pares de átomos de oxigênio em torno de átomos de nióbio e titânio da matriz metálica (processos Nb-O-O e Ti-O-O).

(CNPq-PIBIC/UNESP, FAPESP e FUNDUNESP)

## MICRODIFRATOMETRIA NO ESTUDO QUANTITATIVO DE MATERIAIS

M. C. C. Ferraz\*; P. I. Paullin F<sup>o</sup>\*; H. C. Basso\*\*

\* DEMA - UFSCar

\*\* DFI - IFSC - USP

*Palavras-Chave:* difratometria, cerâmicas, ligas-metálicas

Para análise de pequenas áreas (até  $700 \mu m^2$ ) em materiais, dispomos de um microdifratômetro automático Rigaku que elimina os inconvenientes do método fotográfico (perda de tempo no processamento do filme, reduzida precisão de análise, etc), mantendo as características necessárias para uma análise por raios-x. Porém, ele possui um inconveniente: pelo fato do sistema ótico diferir do goniômetro convencional, a intensidade relativa do feixe difratado medido por esse equipamento torna-se diferente dos valores do equipamento convencional. Consequentemente, não se pode usar o arquivo JCPDS e nem tão pouco programas baseados no método de Rietveld. Nosso trabalho com o microdifratômetro consistiu na otimização do mesmo e na criação de "softwares" para adaptação dos dados de saída do equipamento de microdifratometria para programas que utilizam geometria de equipamentos convencionais. Para tanto adotamos o seguinte procedimento: otimização do equipamento que consistiu na melhoria do alinhamento do mesmo e melhorias na técnica de preparação das amostras; difratometria de materiais conhecidos com o objetivo de verificar a qualidade dos dados; desenvolvimento dos programas de adaptação da geometria do aparelho à geometria convencional; utilização do sistema de microdifratometria e programas que utilizam o Método de Rietveld para o estudo de amostras de interesse. Com relação às correções na geometria, trabalhamos com os seguintes fatores: Lorentz, absorção, fendas e filtros. Os testes feitos em materiais conhecidos utilizaram amostras de  $BaCuO_2$ ,  $Y_2BaCuO_5$ ,  $Al_2O_3 + CuO$  mostrando resultados satisfatórios que possibilitaram a aplicação a materiais de interesse. Concluindo, a melhoria da coleta de dados e adaptação deste equipamento à programas convencionais criou condições para a aplicação do mesmo para o estudo quantitativo de ligas metal-cerâmica e cerâmica-cerâmica (espinélio, zircônia, alumina, óxidos de titânio, titanatos e outros).

(CNPq - FAPESP)

## CÁLCULO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA E GRADIENTE DE CAMPO ELÉTRICO DA FASE DE LAVES $ZrV_2$

*Sergio B. Legoas, Helena M. Petrilli, e Sonia Frota-Pessôa*

Departamento de Física dos Materiais e Mecânica  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* estrutura eletrônica, gradiente de campo elétrico, fase de Laves

A fase de Laves  $ZrV_2$  tem sido estudada intensamente nos últimos anos devido às suas propriedades supercondutoras, eletrônicas, e pela sua grande capacidade de armazenamento de hidrogênio, que faz dele importante em aplicações tecnológicas. Embora os aspectos macroscópicos do seu comportamento sejam bem conhecidas, muitos dos aspectos microscópicos não são totalmente compreendidos. Neste trabalho apresentamos os resultados do cálculo de estrutura eletrônica e GCE deste material, usando o RS-LMTO-ASA, método de primeiros princípios, dentro do formalismo da funcional de densidade local. A densidade de estados,  $N(E)$ , mostra que o nível de Fermi,  $E_F$ , está num pico pronunciado no Zr e V devido às contribuições das bandas p e d. As bandas s e p no Zr estão mais ocupadas que no V, embora a banda d no Zr está menos que no V. As ocupações  $n_x, n_y, n_z$  da banda d são iguais. No caso da banda d, as ocupações  $n_{xy}, n_{xz}, n_{yz}$  são iguais, e também  $n_x^2, n_y^2, n_z^2$ . Dentro da nossa precisão, o GCE no Zr dá zero; no V a contribuição p ao GCE é quase o dobro que a d, e elas estão ao longo da direção [111]. O parâmetro de assimetria  $\eta$  é zero porque as componentes  $V_{xx}$  e  $V_{yy}$  do tensor GCE são a metade do  $V_{zz}$ . As nossas conclusões são: (1) as DOS indicam que existe uma interação Zr-V em todo o rango de energia, isto é devido às contribuições dos elétrons p e d; (2) o deslocamento da  $E_F$  faria diminuir rapidamente a  $N(E_F)$  pelo que é possível ter um controle da posição da  $E_F$  mediante a concentração de hidrogênio no  $ZrV_2$ ; (3) a maior contribuição ao GCE no V é devido à banda p, pela maior contribuição da integral radial  $I_{pp}$  respeito a  $I_{dd}$ .

(CAPES, FAPESP)

## TUNELAMENTO ASSISTIDO EM METAIS

*Luis Roberto Ramos e Valter Luiz Líbero*

Instituto de Física de São Carlos - USP, São Carlos - SP

*Palavras-chave:* Grupo de Renormalização Numérico, tunelamento, calor específico

O problema de um íon tunelando entre dois sítios em uma rede metálica tem atraído atenção desde longa data.<sup>(1, 2, 3)</sup> Kondo em 1976, propôs um modelo em que um íon, por estar acoplado eletrostaticamente com a banda de condução do metal, *arrasta* os elétrons da mesma. Como consequência, a taxa efetiva de tunelamento diminui, como mostrou Kondo por um cálculo perturbativo<sup>1</sup> e posteriormente Yamada com um cálculo exato.<sup>3</sup> Nesse modelo de Kondo, o tunelamento é intrínscio à impureza. Nós estamos estudando o efeito de um tunelamento iônico assistido pelos elétrons de condução, isto é, tunelamento a custa de um espalhamento na banda de condução. Esse termo compete com o tunelamento intrínscio e tem sido apontado por Zawadowski e colaboradores ser importante em baixas temperaturas.<sup>4</sup> Esse é o ponto que abordamos neste trabalho, calculando o calor específico do modelo utilizando a técnica de Grupo de Renormalização Numérico.<sup>5</sup>

<sup>1</sup> J. Kondo, *Physica B* 84, 207 (1976).

<sup>2</sup> A. O. Caldeira, A. J. Legget, *Phys. Rev. Lett.*, 46, 211 (1981).

<sup>3</sup> K. Yamada, A. Sakurai e M. Takeshige, *Progress Theor. Phys.*, 70, 73 (1983).

<sup>4</sup> G. Zaránd, A. Zawadowski, *Phys. Rev. B* 50, 932 (1994).

<sup>5</sup> K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* 47, 773 (1975).

(CNPq, FAPESP)

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E ESTABILIDADE DO SÓDIO SÓLIDO EM BASE DE UM POTENCIAL INTERIÔNICO EFETIVO

*Viatcheslav I. Zubov, Álvaro A. Caparica, Nicolai P. Tretiakov, Manoel A. G. Carvalho*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás

*Palavras-Chave:* equação de estado, propriedades termodinâmicas em metais, anarmonicidade

A investigação teórica das propriedades atômicas de metais líquidos ou sólidos enfrenta uma dificuldade relacionada com a presença de elétrons de condução quase livres. A maioria dos cálculos se baseia no método do pseudo-potencial, no qual as oscilações da rede são consideradas, em geral, como quase-harmônicas, enquanto que a influência da anarmonicidade é considerada, na melhor das hipóteses, através da teoria de perturbações. Em nossos cálculos aplicamos o potencial interiônico de Schiff par a par ao sódio sólido. Ele foi inicialmente proposto para a fase líquida e, em seguida, foi estendido também à sólida baseado no método da dinâmica molecular. Nós nos baseamos no método correlativo do campo autoconsistente não simetrizado (CUSF - correlative method of the unsymmetrized self-consistent field). Para o sódio, a pressão normal, a temperatura teórica de perda de estabilidade  $T_i \cong 662K$ , que vem a ser 1,8 vezes maior que o ponto experimental de fusão  $T_m = 371K$ . No ramo inferior da curva isobárica  $B_T(T, a_1) > 0$  e no superior  $B_T(T, a_2) < 0$ , o que aponta para a absoluta instabilidade dos estados  $a_2(T)$ . Ao longo do ramo inferior calculamos todo um conjunto de propriedades termodinâmicas de equilíbrio: coeficiente de expansão térmica, os módulos  $B_T$  e  $B_S$ , isotérmico e adiabático, as capacidades térmicas  $C_V$  e  $C_P$ , o parâmetro de Grüneisen, as componentes isotérmicas e adiabáticas do tensor de elasticidade, bem como a velocidade do som.

(CNPq, CAPES)

## INFLUÊNCIA DA COMPACTAÇÃO NA POROSIDADE E PERMEABILIDADE DE FILTROS DE LATÃO

*W. M. Lima e J. da S. Esteves*

Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá

**Palavras-Chaves:** compactação, permeabilidade, sinterização

No dimensionamento de um filtro metálico, a porosidade interligada e a permeabilidade são parâmetros fundamentais. Estes dependem não só da temperatura e do tempo de sinterização, mas principalmente, do tamanho das partículas de pó utilizado e da pressão de compactação. Para este trabalho, as amostras porosas foram obtidas de pó de latão atomizado a gás. Deste material, três intervalos granulométricos de "mesh" 60 a 65, 65 a 80 e 80 a 100 e três níveis de pressão de compactação (42 MPa, 96 MPa e 125 MPa) foram utilizados. Amostras em forma de discos de 25,4 mm de diâmetro e com espessuras variando entre 1,9 e 2,5 mm foram produzidas e sinterizadas a uma temperatura de 850°C durante 45 minutos, num forno tubular com uma taxa de aquecimento de 5°C por minuto. As amostras assim produzidas foram caracterizadas segundo as normas ISO STANDART 4003 e 4022. Os testes da bolha, nas amostras compactadas à 42 MPa, forneceram diâmetros médios dos poros iguais a 39,65; 35,51 e 25,32 µm, respectivamente; já nas amostras compactadas à 96 MPa estes valores atingem 25,02; 21,69 e 16,86 µm, porém, na pressão de 125 MPa os valores obtidos são 17,78; 16,42 e 8,70 µm. Por outro lado, os testes de permeabilidade para um escoamento laminar demonstram que o coeficiente de permeabilidade das amostras compactadas à 42 MPa ( $8,91 \times 10^{-12} \text{m}^2$ ) é, em média, uma ordem de grandeza superior aos obtidos nas amostras compactadas à 96 MPa e 125 MPa ( $1,28 \times 10^{-12} \text{m}^2$ ;  $0,68 \times 10^{-12} \text{m}^2$ ). Além disso, é possível observar dos dados obtidos, que a partir de uma pressão em torno de 100 MPa o coeficiente de permeabilidade tende a um valor em torno de  $1 \times 10^{-12} \text{m}^2$  para os três intervalos granulométricos usados neste trabalho. Esta pressão de compactação deve corresponder a um fator limitante da permeabilidade dos filtros produzidos de pó de latão via sinterização.

## MICROFUROS EM MATERIAIS METÁLICOS USANDO DESCARGA ELÉTRICA CONTROLADA

*Marcelo Silva Stiel e José Augusto Pedro e Lima*

Lab. Ciências Físicas, Univ. Estadual do Norte Fluminense

**Palavras - Chaves:** Metálicos, Microfuros, Descarga

Neste trabalho apresentamos um método para produzir microfuros em materiais metálicos, visando utilização na construção de filtros espaciais com aplicação na óptica de precisão, na produção de aerossóis, na indústria que utiliza a tecnologia de microfuros. As técnicas lasers têm sido utilizadas com sucesso na produção de microfuros, mas com custos elevados devido ao preço do laser. Portanto estamos propondo a utilização de uma descarga elétrica controlada para produzir os microfuros. O sistema de controle é composto por dois eletrodos sendo um fixo e outro móvel, de um circuito eletrônico que gera e controla um pulso quadrado com uma largura variável, de 2ms a 20µs, com variação de frequência de 1 Hz a 2kHz. Um sistema mecânico permite deslocar o eletrodo com um passo de 50µm, podemos aproximá-lo da placa metálica que esta colocada sob uma pequena mesa de acrílico com um furo, onde está localizado o eletrodo fixo, produzindo a descarga entre os dois eletrodos de modo a gerar o microfuro. Uma luneta simples esta instalada de forma a possibilitar o controle visual da geração do mesmo. Com este protótipo simples e de baixo custo foi possível até o estágio atual da pesquisa fazer microfuros de 150 µm de diâmetro em uma placa metálica de aço inox com 60 µm de espessura. O método mostra-se promissor sendo extremamente baixo seu custo de aplicação, o mesmo tem apresentado uma dificuldade no controle da reprodução dos microfuros, o que não ocorre com os métodos que usam o laser. Estamos pesquisando quais os parâmetros, tais como: frequência do pulso, distância entre eletrodos, que vai otimizar o nosso método, para melhorar a sua reprodutibilidade e garantir as propriedades geométricas dos microfuros.

## DINÂMICA DE REDE DE MOLIBIDÊNIO E CROMO BASEADO NA DEPENDÊNCIA DE TEMPERATURA

*Clodoaldo Garcia Garcia e Madan Mohan Shukla*

Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP - Câmpus de Bauru

*Palavras-chave:* fônons, curva de dispersão, metal de transição

O estudo de dinâmica de rede de metais de transições de estrutura cúbica é bem complicado em comparação de metais alcalinos. A estrutura eletrônica de metais de transição cria muita dificuldade em separar os elétrons de camada *s*, *p* e *d* isto deixa a superfície de Fermi não esférica. Isto indica que um modelo que tem sucesso para metais alcalinos não pode alcançar o mesmo sucesso para metais de transições. Na literatura existe vários modelos de metais cúbicos baseados no primeiro princípio. Nesse trabalho nós seguimos um modelo desenvolvido por nós<sup>1,2</sup> que deu certo para o sódio e cobre. Nos estudamos os dois metais de transição ie molibidênio e cromo pelo mesmo esquema. Nós consideramos a força central com quatro parâmetro, força angular com dois parâmetros e força eletrônica com um parâmetro. Determinamos os sete parâmetros de modelo com três constantes elásticas e quatro frequências de fônons de vetor de onda próxima a primeira zona de Brillouin. Como existe valores experimentais de constantes elásticas e fônons para várias temperaturas para os dois metais, nos calculamos as curvas de dispersão desses dois metais em várias temperaturas em todas as direções de simetria e  $[k,0,0]$ ,  $[k,k,0]$  e  $[k,k,k]$  e comparamos os resultados teóricos com valores experimentais de fônons.

<sup>1</sup> M. M. Shukla and C. R. Grandini, Abstracts of XIII SLAFES, pag. Cp Th 16C, Gramado (RS), 1995.

<sup>2</sup> C. R. Grandini and M. M. Shukla, Abstracts of XIII SLAFES, pag. Cp Th 7C, Gramado (RS), 1995.

## CLUSTER CALCULATIONS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Fe<sub>4</sub>C

*J. C. Krause<sup>a</sup>, C. Paduani<sup>b</sup> and M. I. da Costa Jr.<sup>a</sup>*

<sup>a</sup>Instituto de Física - UFRGS - RS, <sup>b</sup>Departamento de Física - UFSC - SC

*Palavras-Chave:* magnetismo, estrutura eletrônica, carbetos

In this work the electronic structure of Fe<sub>4</sub>C is investigated with the first-principles discrete variational method (DV)<sup>1</sup>, ispin-polarized case, within the framework of the local density approximation of density functional theory. The Fe<sub>4</sub>C (fcc) has a simple cubic crystal structure where the iron atoms occupy two non-equivalent sites, i.e. corner sites (FeI) and face-centered sites (FeII), while the carbon atoms occupy body-centered sites. The calculations are performed in molecular clusters which are embedded in the long-ranged Coulomb potential of the crystal, consisting of 350 atoms. The results are obtained for the two non-equivalent iron sites in this compound, besides the investigation at the interstitial carbon sites. Regarding interstitial compounds such as iron carbides, some models have been out forward for structural modifications occurring during the aging of iron-carbon martensite. The studies in virgin martensite have indicated that higher carbon region on iron-based alloys formed at room temperature are probably due to the formation of clusters of ordered arrangements of Fe<sub>4</sub>C. Magnetization studies in the ordered compound have given magnetic moments of 2.6687 and 1.7036  $\mu_B$  for the two nonequivalent iron sites. The results of the present calculations are 2.664 and 1.3  $\mu_B$ . Furthermore, the C atom acts as an acceptors for electrons, suffering an inflow of about -0.37 electrons. The charge transfer for the iron sites are -0.07 for the corner sites, and +0.06 for face centered sites. The analysis of the lattice spacing dependence of the total electronic energy of the cluster have indicated a minimum at that value adopted as the initial choice for this compound.

(\*CNPq)

1 - C. Paduani and J.C. Krause, J. Magn. Magn. Mat. 138, 109 (1994).

## CINÉTICA DE CRESCIMENTO DA FASE INTERMETÁLICA NiAl<sub>3</sub>

Vitor Hugo Garcia<sup>\*</sup>, Claudio Scherer<sup>#</sup> e Paulo Machado Mors<sup>#</sup>.

<sup>\*</sup>Departamento de Física da Universidade do Estado de Santa Catarina.

<sup>#</sup>Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

*Palavras-Chave:* interdifusão, formação de fases, NiAl<sub>3</sub>

Em uma bicamada de elementos distintos A/B que se misturam, isotermicamente, por um processo puramente difusivo, ao longo do tempo observa-se o aparecimento de regiões com estequiometrias bem definidas, determinadas experimentalmente como sendo as fases do sistema binário A/B, previstas no diagrama de fases. Estas regiões são separadas entre si por interfaces móveis, geralmente planares. O problema consiste em descrever teoricamente a cinética de formação e/ou desaparecimento das fases em um par de difusão. Através da solução numérica (método explícito de diferenças finitas) da equação da difusão unidimensional, usando uma difusividade dependente de concentração, descrevemos a cinética de formação das camadas das fases em uma bicamada planar de elementos A/B. Ao contrário dos métodos existentes na literatura, onde as velocidades das interfaces são introduzidas como variáveis explícitas, introduzimos as propriedades das diferentes fases como parâmetros da difusividade. Em trabalho já publicado, usando este método, descrevemos a cinética das fases no sistema Co/Si, onde os resultados teóricos têm boa concordância com dados experimentais. No presente trabalho ajustamos teoricamente as curvas de crescimento do composto intermetálico NiAl<sub>3</sub> no sistema Ni/Al, obtidas experimentalmente para várias temperaturas, por diferentes autores. A difusividade que obtivemos como função da temperatura concorda, a menos de uma constante, com os resultados existentes na literatura. O sucesso neste ajuste reforça a idéia de que desenvolvemos um procedimento matemático natural onde o crescimento e/ou desaparecimento, e até mesmo o reaparecimento das fases, surgem como solução da equação da difusão, nos casos de cinética controlada por difusão.

(CNPq, FINEP, FAPERGS e UDESC)

## CONDUTIVIDADE DE UM SISTEMA ELETRÔNICO DE DUAS BANDAS, COM DESORDEM DE IMPUREZAS ENVOLVENDO CORRELAÇÕES ESPACIAIS DO TIPO INVERSO DE POTÊNCIA

Maria Cristina Varriale

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS

*Palavras-Chave:* localização fraca, condutividade, multibandas

Para explorar efeitos de localização fraca em um metal desordenado, no qual ocorrem espalhamentos elétron-impureza não apenas intrabanda mas também interbanda, que envolvem correlações decaindo algebricamente com a distância, calculamos, em uma dimensionalidade arbitrária  $d$ , o Cooperon para um sistema de elétrons não interagentes, à temperatura  $T=0$ , na presença de potenciais de impurezas, aleatórios estáticos, caracterizados por correlações

$$W_{\alpha\beta}(\vec{r}) = [W_0\delta(\vec{r}) + W_1 r^{-(d+\sigma)}] \delta_{\alpha\beta} + [W_0'\delta(\vec{r}) + W_1' r^{-(d+\sigma')}][1 - \delta_{\alpha\beta}]$$
, onde  $\alpha$  e  $\beta$  são índices de banda, enquanto  $\sigma$  e  $\sigma'$  são parâmetros arbitrários. Em analogia à técnica utilizada em nosso trabalho anterior<sup>1</sup>, no qual, adotando um modelo de elétrons em uma única banda de condução, investigamos as correções quânticas à condutividade metálica, para  $W(\vec{r}) = W_0\delta(\vec{r}) + W_1 r^{-(d+\sigma)}$ , através de um tratamento perturbativo até primeira ordem em  $W_1$ , estendemos a abrangência deste método, de modo a efetuar um cálculo até primeira ordem em  $W_1$  e em  $W_1'$ , para o sistema eletrônico de duas bandas acima descrito, em um regime fracamente desordenado. Em conformidade com investigações prévias a respeito de multibandas em localização fraca, para interações elétron-impureza do tipo contato<sup>2</sup>, nossos resultados evidenciam a universalidade da teoria, também com a inclusão de tal potencial de longo alcance, no sentido de que efeitos de duas bandas, em uma dimensionalidade arbitrária  $d$ , ainda podem ser obtidos através da mesma fórmula válida para elétrons em banda única, desde que seus parâmetros sejam apropriadamente interpretados, mediante a definição de parâmetros "efetivos" do sistema.

<sup>1</sup> Varriale, M. C. e Theumann, A., Phys. Rev. B **52**, 4651 (1995).

<sup>2</sup> Rainer, D. e Bergmann, G., Phys. Rev. B **32**, 3522 (1985).

## CÁLCULO DO FATOR DE ESTRUTURA DINÂMICO EM $Ta_{67}W_{33}$ .

*Bernardo Laks \**

*Momotaro Imaizumi \*\**

\*Departamento de Física Aplicada - Instituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp - Campinas .

\*\* Departamento de Física - Faculdade de Ciências - Unesp - Bauru.

Palavras chaves : fonons , fator de estrutura , potencial.

O método da dinâmica molecular foi inicialmente desenvolvido para sistemas de esferas rígidas e o uso de potenciais contínuos conjuntamente com o método da dinâmica molecular tem sido usados para o simular as propriedades de equilíbrio e dependentes do tempo em fluidos densos e líquidos. Entretanto o uso da dinâmica molecular não é restrito aos líquidos e fluidos densos, sendo também aplicado para simular propriedades dinâmicas de estruturas sólidas. As simulações de dinâmica de rede para os sólidos estão restrito ao cálculo das funções de auto correlações e a determinação indireta das curvas de dispersão de fonons dependem da resposta de um cristal a uma perturbação externa. Entretanto, vibrações de rede são modos coletivos altamente e diretamente relacionados a um espectro de flutuações de densidades que é por sua vez relativo a uma seção diferencial de choque para espalhamento inelástico de neutrons térmicos. Estes espectro é o fator de estrutura dinâmico  $S(\vec{Q}, \omega)$ , que é a transformada de Fourier em relação ao tempo da função correlação do operador densidade. O fator de estrutura dinâmico  $S(\vec{Q}, \omega)$  é calculado pelo método da dinâmica molecular para um sistema de  $N$  partículas distribuídas em uma rede bcc com condições de contorno periódicas e com interações de  $n$  camadas de vizinhos por meios de potenciais de pares de forças centrais e potenciais multiônicos originados da teoria geral do pseudo-potencial. O presente trabalho é uma aplicação do método de dinâmica molecular em ligas de metais bcc de transição de  $Ta_{67}W_{33}$  onde foi calculado o fator de estrutura dinâmico para calcular as propriedades de dinâmica de rede. Os resultados obtidos são comparáveis aos valores experimentais.

(CNPq e FAPESP)

## EFEITO DA FORÇA ANGULAR EM FÔNONS DE DIREÇÕES DE NÃO SIMETRIA EM COBRE E ALUMÍNIO

*Carlos Roberto Grandini e Madan Mohan Shukla*

Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP - Câmpus de Bauru

*Palavras-chave:* fônons, curva de dispersão, cobre

Apesar dos modelos teóricos para dinâmica de rede de metais cúbicos serem desenvolvidos por mais de quatro décadas, sempre existe uma possibilidade de apresentar um novo modelo que justamente satisfaz todas as condições físicas e também reproduz com exatidão algumas propriedades experimentais. Basicamente, existem duas categorias diferentes de se propor um modelo, uma é baseada em primeiros princípios, onde o movimento de elétrons no metal é considerado exatamente, chamado modelo de primeiros princípios. Na outra categoria, o movimento dos elétrons é considerado fenomenologicamente. Nós propusemos recentemente<sup>1,2</sup> um modelo fenomenológico para metais, que denominamos modelo completo e consistente de metais cúbicos e determinamos a curva de dispersão de fônons nas direções de simetria para os metais cobre e sódio. Nós encontramos uma excelente concordância com os valores experimentais para fônons nestes metais. Cobre e alumínio são dois metais para os quais existem valores experimentais de fônons em alguns vetores que não pertencem a direções de simetria<sup>3</sup>. Neste trabalho, nós usamos o modelo por nós desenvolvido para encontrar o efeito da força angular em fônons de direções de não simetria em cobre e alumínio. Nossos cálculos foram efetuados primeiro desprezando a força angular e depois incluindo a força angular. Nós mostramos que a inclusão da força angular realmente é importante para fônons que não pertencem a direções de não simetria.

<sup>1</sup> C. R. Grandini and M. M. Shukla, Abstracts of XIII SLAFES, pag. CPT7c, Gramado (RS), 1995.

<sup>2</sup> M. M. Shukla and C. R. Grandini, Abstracts of XIII SLAFES, pag. CPT16c, Gramado (RS), 1995.

<sup>3</sup> R. Stedman and G. Nilsson, Phys. Rev. 145, 492 (1966).

## DINÂMICA DE REDE DE METAIS AMORFOS DE FERRO

*Silmar Antônio Travain e Madan Mohan Shukla*  
Departamento de Física, Faculdade de Ciências, UNESP - Campus de Bauru

*Palavras-chave:* metal amorfo, fônons

O estudo teórico da dinâmica de rede de metais é um assunto de grande interesse por várias décadas. Existe na literatura dezenas de modelos teóricos disponíveis para confirmar os dados experimentais de fônons nas direções de simetria. Para um metal amorfo não existe nenhum dado experimental de curva de dispersão ou constantes elásticas; metais amorfos não têm estrutura cristalina, assim não existe separadamente as curvas de dispersão nas direções de simetria. Só existe ondas longitudinais e transversais para cada valor do vetor de onda. Quase uma década atrás Bhatia e Singh<sup>1</sup> desenvolveu um modelo para metais amorfos. Esse modelo necessitava de uma informação prévia da maneira como era um metal em estado cristalino; era fcc ou bcc antes de se tornar metais amorfos. Bhatia e Singh<sup>1</sup> estudaram o metal amorfo de ferro calculando as curvas de dispersão para ondas longitudinais e ondas transversais. Recentemente Campanha e Shukla<sup>2</sup> mostram que o modelo de Bhatia e Singh<sup>1</sup> é errado em descrever a matriz de interação de elétron-íon. Assim cálculo numérico de fônons feito pelo Bhatia e Singh<sup>1</sup> é errado para o ferro. Nós calculamos de novo a curva de dispersão de fônons para metal amorfo de ferro e também comparamos com o resultado de Bhatia e Singh<sup>1</sup> para mostrar qual parte da curva de dispersão mudou com a correção proposta por Campanha e Shukla<sup>2</sup> no modelo de Bhatia e Singh<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> A.B. Bhatia and N. Singh, Phys. Rev. B 31, 4751 (1985)

<sup>2</sup> M.M. Shukla and J.R. Campanha, Phys. Rev. B (Submitted for publication ).

## ANÁLISE DA DISPERSÃO DE METAIS NA SUPERFÍCIE DE CATALISADORES POR ESPALHAMENTO DE RAIOS-X COM DISPERSÃO DE ENERGIA

*Roberto Fernandes Silva Andrade*  
Instituto de Física - Universidade Federal da Bahia  
*Heloysa Martins Carvalho Andrade*  
Instituto de Química - Universidade Federal da Bahia

*Jurgen Kropp*  
Potsdam Institute for Climate Impact Research - Potsdam - Alemanha

*Palavras-Chaves:* catalisadores, fractais, EDS

A técnica de espalhamento de raios-x com dispersão de energia (EDS) associada à microscopia eletrônica tem permitido a localização de compostos em um substrato. Este procedimento é bastante útil no estudo de catalisadores multi-componentes, onde metais finamente dispersos são depositados ou co-precipitados em um substrato ou suporte. Nosso objetivo neste trabalho é analisar as imagens da distribuição dos cristaltos metálicos usando conceitos de geometria fractal. Recentemente estes conceitos têm despertado grande interesse no estudo e caracterização de catalisadores. Estes compostos têm alta área específica e a dependência de sua atividade com relação à dispersão das espécies ativas podem ser convenientemente explicados com auxílio de fractais. Primeiramente testamos o método com um catalisador de  $CuO-ZnO-Al_2O_3$  usado na reação de *shift* de  $CO$ , obtendo imagens que indicam a posição de  $Zn$  e  $Cu$  sobre o substrato. As dimensões fractais  $D_F$  e multi-fractais  $D(q)$  das distribuições destes elementos são determinadas pelo método de contagem de caixas. Como esperado, os valores encontrados são  $D_F < 2$ , já que a imagem tratada é uma projeção bidimensional da superfície rugosa. Observou-se também que quanto maior é a densidade superficial do metal mais perto de 2 é o valor obtido para  $D_F$ . Encontrou-se evidências de grande uniformidade da distribuição de metal pela forma da função  $D(q)$ , fracamente dependente de  $q$ . Em seguida tomamos um conjunto de amostras de catalisador onde cobre, em diferentes teores, foi depositado sobre um suporte do tipo espinélio  $ZnAl_2O_4$ . A dispersão de  $Cu$  foi determinada por quimissorção e por EDS e correlacionada com a atividade do catalisador na reação de *shift*.

## FORMATION OF Fe-Ag ALLOYS PREPARED BY MECHANICAL ALLOYING

*J. Gómez Romero, S. K. Xia and E. Baggio-Saitovitch*

Centro Brasileiro de Pesquisas Fisicas. Rua Xavier Sigaud 150, Urca, 22290-180,  
Rio de Janeiro, RJ, Brazil

**Keywords:** alloys, solubility, Mössbauer

It is known that Ag-Fe is an immiscible system. The solubilities of Fe in Ag and Ag in Fe matrix is less than 0.01at% at their melting points. Preparation of alloys from immiscible systems has become an extensive subject in the last few decades. Vapor quenching has been proved to be an effective technique for this purpose. Sumiyama first obtained Ag-Fe alloys in the whole composition range by sputter-deposition method at room temperature. Using thermal evaporation method, we also obtained Ag-Fe alloy films in liquid He cooled substrates. In recent years, mechanical alloying (MA) was found to be another powerful technique for preparation of supersaturated alloys. An advantage of MA is that it can produce a great amount of powder material suitable for application. In this work, we performed a MA on the Ag-Fe system.

Mechanical alloying (MA) was performed on the Ag and Fe elemental powders with Fe composition of 8, 15, 30 and 80 at%. As the milling equipment we used a Spex Mixer/Mill Model 8000. The milling was carried out in an argon atmosphere. After long time (300 - 400 hours) ball milling, Ag-Fe alloys were formed in all the samples. The alloying processes were followed by X-ray diffraction and Mössbauer spectroscopy. The X-ray diffraction patterns show a little broadening and continuous reduction of the intensities of the peaks with the milling time. The Mössbauer spectroscopy results reveal that the ball milling also leads to the formation of Fe<sup>+2</sup> oxide for partial Fe atoms. We found that the Fe particles can precipitate from the Fe<sup>+2</sup> oxide after hydrogenation at a temperature of 350°C for 70 hours at which there is not significant segregation in the alloy phase.

(CNPq/CBPF)

## FREE ENERGY CALCULATION IN COPPER USING ADIABATIC SWITCHING

*Maurice de Koning and Alex Antonelli*

Departamento de Física do Estado Sólido e Ciência dos Materiais  
Instituto de Física IFGW, Universidade Estadual de Campinas-SP

**Palavras-Chave:** free energy, vacancy, molecular dynamics

In this work we present the results of the free energy calculations in copper applying the adiabatic switching method. The method is based on the Hertz theorem of classical statistical mechanics. This theorem states that in an adiabatic transformation of a system described by an ergodic, Hamiltonian energy conserving dynamics  $D_0$  into another system described by  $D_1$ , a constant energy shell  $\sigma(E_0, D_0)$  with phase-space volume  $\Omega$  is precisely mapped upon the constant energy shell  $\sigma(E_1, D_1)$  which has exactly the same phase-space volume  $\Omega$ . The simplest application of the method involves switching processes within the microcanonical ensemble. In this case one performs a switching procedure connecting a constant energy shell of a reference system of which the energy-entropy relation is known to a constant energy shell of the system of interest. Although the energy of the final constant energy shell will generally be different of the initial, its corresponding entropy will be the same. It can be shown that if the adiabatic switching procedure is performed under constant temperature conditions, one can determine the Helmholtz free energy difference between system of interest and reference in a similar manner. The advantage of adiabatic switching in relation to methods based on the harmonic approximation or thermodynamic integration is that no approximations are involved and that it is computationally less demanding. We have applied the adiabatic switching method to determine the free energy of bulk copper as well as the formation free energy of a monovacancy in copper as a function of temperature. The switching procedures were established by constant temperature molecular dynamics simulations. As a model for copper we used a semi-empirical tight-binding potential. To determine the free energy of bulk copper we performed switching procedures connecting the tight-binding copper model to a crystal of independent harmonic oscillators with the same structure as the copper lattice and with only one characteristic frequency. The vacancy formation free energy in copper has been determined by a switching procedure in which the interaction of one copper atom is slowly turned off. The results agree well with experimental values.

## FONONS EM LIGAS BINÁRIAS BCC DE TÂNTALO E TUNGSTÊNIO.

Momotaro Imaizumi\*

Bernardo Laks\*\*

\*Departamento de Física da Faculdade de Ciências -Unesp -Bauru.

\*\* Departamento de Física Aplicada Instituto de Física Gleb Wataghin  
Unicamp- Campinas.

Palavras Chaves : fonons , ligas , pseudo - potencial.

Nas últimas décadas , as frequências de fonons de metais e das ligas foram calculadas com o uso de modelos fenomenológicos de constantes de forças ou com o uso da teoria eletrônica dos sólidos originadas de cálculos de primeiros princípios baseados no formalismo da teoria geral de pseudo-potencial. Recentemente J.A. Moriarty usou o conceito de forças angulares, por meio de modelo analítico que considera os potenciais explícitos de três e quatro ions  $v_3$  e  $v_4$  respectivamente , extraídos da teoria geral de pseudo-potencial , para aplicar em metais bcc de transição como o molibdênio. A presença de forças angulares , nos metais bcc de transição ,provocadas pelas interações de estados d é observada pelas propriedades estruturais e vibracionais destes materiais. Entretanto o cálculo destas propriedades estruturais e vibracionais nos metais bcc de transição envolve potencial de pares de forças centrais que é composto de interações diretas de curto alcance d-d entre ions e interações de hibridização indiretas de longo alcance sp-d entre os ions . No cálculo das propriedades citadas , temos também a influência dos potenciais triplet  $v_3$  e quadruplet  $v_4$  devido as interações de curto alcance dos estados d. Estes potenciais são usados nos cálculos das constantes elásticas e frequências de fonons a volume constante através de suas derivadas primeiras e segundas. No presente trabalho estendeu-se o conceito de forças angulares originadas dos potenciais de interações multiônicas  $v_3$  e  $v_4$  adicionado ao conceito de potencial de pares de forças centrais  $v_2$  para as ligas de metais bcc de transição ,  $Ta_{1-x}W_x$  com  $x = 0.77$  ,  $x = 0.50$  e  $x = 0.33$  para calcular as frequências de fonons , constantes elásticas , densidades de estados de fonons e calor específico destes materiais. Os resultados obtidos são comparáveis aos valores experimentais .

## FORMAÇÃO DE FASES METAESTÁVEIS EM LIGAS DE $RT_2$

(R = Gd, Y e T = Fe, Co)

C. Larica<sup>1</sup>, K.M.B. Alves<sup>1</sup>, A. Biondo<sup>1</sup>, E. Baggio-Saitovitch<sup>2</sup>, A.P. Guimarães<sup>2</sup> e C.V.B. Tribuzy<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória - ES

<sup>2</sup> Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro - RJ

Palavras-Chaves: fases metaestáveis, metais e ligas, magnetismo

A técnica de moagem severa tem sido usada para obter fases metaestáveis a partir de compostos intermetálicos tipo fase de Laves  $RT_2$  (R = Gd, Y e T = Fe, Co). Apesar das similaridades dos materiais iniciais e dos cuidados tomados para se manter as mesmas condições experimentais, resultados diferentes e inesperados foram obtidos para os diferentes compostos. O composto  $YFe_2$  formou fase amorfa com 50 horas de moagem e, até onde espectros de raios-X (DRX) e de Mössbauer (EM) do Fe podem ser resolvidos, nenhuma fase cristalina foi observada na amostra moída. Entretanto, componentes de R e T foram fortemente segregados após poucas horas de moagem nas outras ligas. No caso do  $GdFe_2$  um máximo de segregação foi observado em aproximadamente 25 horas de moagem e os resultados de EM e DRX mostraram, consistentemente, formação de uma fase amorfa de Gd/Fe para tempos de moagem mais longos, indicando que ocorreu reação de estado sólido entre as fases segregadas. Além do Fe- $\alpha$ , a outra componente segregada apresentou picos de Bragg de uma rede fcc bem definida após as primeiras horas de moagem. As linhas das fases fcc e Fe- $\alpha$  alargaram e reduziram de intensidade continuamente com o aumento do tempo de moagem. As fases fcc observadas para o  $GdT_2$  e  $YCo_2$  podem ser associadas ao Gd e ao Y metálicos, de acordo com o sistema considerado, e foram estabilizadas devido à presença de impurezas de Fe (ou Co) e principalmente devido as altas pressões mecânicas resultantes dos impactos do moinho.

## ESR of $Gd^{+3}$ in $(Yb,Y)InCu_4$ Intermetallic Compounds

*C. Rettori, S. Oseroff and D. Rao*  
San Diego State University, San Diego, CA 92182, U.S.A

*P.G. Pagliuso and G.E. Barberis*  
Instiuto de Física "Gleb Wataghin", UNICAMP, 13083-970, Campinas-SP, Brazil.

*J. Sarrao and Z. Fisk*  
Natal High Field Laboratory, Florida State University, Tallahassee, FL 32306, U.S.A

*M. Hundley*  
Los Alamos, New Mexico 87545, U.S.A

*Palavras-chave:* intermediate-valence, exchange interaction, Korringa rate

Many rare-earth intermetallic compounds present interesting physical properties associated to the hybridization between localized  $f$ -electrons states and conduction-electrons. That had motivated experimentalists and theoreticians, for the last several decades to study strongly correlated electron phenomena in the intermediate-valence (IV) and Heavy-fermion (HF) systems.

Electron Spin Resonance (ESR) experiments of  $Gd^{+3}$  in the intermediate-valence phase ( $T < T_c$ ) of  $YbInCu_4$ , and on the reference compound  $YInCu_4$ , can be interpreted in terms of an enhanced density of states at the Fermi level for Yb-based compounds. The Korringa rate and  $g$ -shift obtained from the ESR measurements and dc susceptibility data allowed us to extract the electron-electron exchange enhancement factor,  $\alpha$ , for the Yb-based compounds. It is found that exchange interaction between the  $Gd^{+3}$  local moments and the conduction-electrons is wave-vector dependent in both compounds.

## CARACTERIZAÇÃO DE CERÂMICAS TIPO PZT PELA TÉCNICA DE CORRELAÇÃO ANGULAR PERTURBADA

*Edison Fernandes Motta\**, *Sylvio Dionysio de Souza\**, *Maristela Olzon-Dionysio\** e *Artur Wilson Carbonari\*\**

\* DF-UFSCar - \*\* IPEN - S.Paulo

*Palavras-Chave:* cerâmicas, pzt, tdpac

Neste trabalho analisamos as medidas do gradiente de campo elétrico (GCE) efetuadas no sítio do Zr de cerâmicas tipo PZT, pela técnica de Correlação Angular Perturbada (CAP), com o objetivo de caracteriza-las. As cerâmicas tipo PZT (Titanato Zirconato de Chumbo), cuja designação abrange o  $PbTiO_3$ , são uma série contínua de compostos criados quando o Ti é gradativamente substituído por Zr, formando o  $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$  até atingir o  $PbZrO_3$ . Elas pertencem a um grupo mais geral de cerâmicas classificadas como Perovskitas, cuja composição é  $ABX_3$  onde A e B são cátions metálicos e X um ânion não metálico. Sua estrutura é cúbica: B ocupando o centro de cada cubo, A os 8 vértices e X situando-se no centro da face de cada cubo. A perovskita ideal é um isolante elétrico e tem grande interesse tecnológico pois exibe um efeito piezoelétrico forte após a polarização. Uma série de medidas de CAP foi realizada à temperatura ambiente para as amostras com porcentagem de 20, 30, 50 e 80 de Zr. Os resultados obtidos mostram que o GCE diminui com o aumento da concentração de Zr. Analisando o diagrama de fase do PZT vemos que  $T_c$  também diminui com o aumento da concentração de Zr, tornando-se mais próxima da temperatura ambiente para altas concentrações de Zr. Dados da literatura evidenciam que o GCE diminui quando se aproxima de  $T_c$ , o que mostra a coerência de nossos resultados. Outra série de medidas foi realizada para a amostra de 20% de Zr, desde a temperatura do Nitrogênio-liquido até 600°C. Esses resultados também são coerentes, pois mostram uma mudança brusca nos valores do GCE no entorno de 400°C, que é a região de transição de fase ferro - paraelétrica, desse PZT. Esses resultados mostram a adequação da CAP na caracterização desse tipo de cerâmica.

(CNPq - FAPESP)

## EXCITATION OF THICKNESS-EXTENSIONAL AND THICKNESS-SHEAR LOW-FREQUENCY RESONANCES IN LITHIUM NIOBATE CRYSTALS

*E. F. de Almeida, A. V. Ghiner, A. C. Hernandez\*, J. A. C. de Paiva, A. S. B. Sombra, and G. I. Surdutovich\*\**

Departamento de Física, UFC, Cx. P. 6030, Campus PICI, 60450-970, Fortaleza-CE

\* Instituto de Física de São Carlos, USP, 13560-970, São Carlos-SP

\*\* also with DSIF, FEE, Unicamp, Cx. P. 6101, 13083-970, Campinas-SP

**Key-words :** surface waves, anisotropy.

We present data of the detailed measurements of complex dielectric function metallic ions ( Fe, Cu, Cr ) doped  $LiNbO_3$  crystals at the frequencies 10-100 KHz. We employed all the possible x, y and z - cut sample orientations and differently disposed electrodes on the surfaces. The comparison of the observed and calculated narrow-resonance frequencies and special test with mechanical stress of the samples had shown the acoustic nature of these resonances [1]. The following main results were obtained:

- A strong dependence of origin of resonances on geometry and position of electrode was observed. The essential anisotropy ( in xy - crystallographic place as well ) was proved.
- The nonlinear effects, such as bistability, harmonic generation and the influence of the applied field on the dielectric permittivity were registered.
- About threefold jumps in the sample background capacitance were observed. The connection of these jumps with the state of the ferroelectric surface inversion layers is discussed. In the case of multi ( more than two ) symmetrically disposed electrodes a specific method of determination both own and reciprocal partial capacities was proposed.

[1] E. F. de Almeida, A. V. Ghiner, A. C. Hernandez, J. A. C. de Paiva, A. S. B. Sombra, and G. I. Surdutovich, submitted to XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Águas de Lindóia, Spt., 1996.

(CNPq)

## DETERMINAÇÃO DE ALTA PERMISSIVIDADE DIELÉTRICA NA REGIÃO DE MICROONDAS EM MATERIAIS FERROELÉTRICOS

*Bássora, L. A., Eiras, J. A., Póvoa, J. M.*

*Departamento de Física-Universidade Federal de São Carlos-SP*

*Palavras-chaves:* permissividade dielétrica, microondas, ferroelétricos.

Cerâmicas ferroelétricas apresentam forte relaxação na permissividade dielétrica em frequências acima de 1 GHz. A origem deste efeito não é clara, já que dos mecanismos de relaxação em dielétricos conhecidos, nenhuma relaxação deveria ser observada na faixa de frequência de  $10^8$  Hz à  $10^{11}$  Hz. Hippel justifica este comportamento por um forte acoplamento dos grãos ou domínios em altas frequências. Uma outra origem possível pode ser atribuída ao movimento das paredes de domínio. A influência de dopantes e tratamentos térmicos (Aging) em cerâmicas de PZT podem fornecer sugestões sobre qual o efeito físico responsável pela relaxação dielétrica neste intervalo de frequência. Investigações em regiões de altas frequências em monocristais de titanato de bário também mostram uma forte relaxação em  $\epsilon''$ , mesmo acima da temperatura de Curie. Por estas razões, sugere-se que os processos de movimento de paredes de domínios e/ou acoplamento dos grãos (ressonância) não são suficientes para a explicação precisa da relaxação dielétrica na região de microondas.

Usando-se uma linha coaxial, a permissividade complexa pode ser calculada a partir do coeficiente de reflexão medido pelo Network Analyser.

Medidas feitas em materiais ferroelétricos como o Titanato de Chumbo dopado com Cálcio-PT(Ca), revelam a presença de uma relaxação próxima à 9 GHz. Considerando a frequência de cisalhamento (Shear) de um grão de PZT ( $10 \mu\text{m}$ ) que é estimada em 240 MHz e levando-se em conta que o tamanho médio de um grão de PT(Ca) é da ordem de  $0.27 \mu\text{m}$ , pode-se estimar a frequência de cisalhamento em 8.8 GHz, o que fornece um dos possíveis mecanismos para a relaxação observada neste material.

## Estudo por ENDOR e Ressonância Geral Tripla sobre a Contribuição de Interações Hiperfinas não Resolvidas na Largura de Linha de RPE de Espécies $\text{CO}_2^-$ em Carbonatos Naturais.

*Delson Ubiratan da Silva Schramm e Alexandre Malta Rossi*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

**Palavras-chave:** carbonatos, radicais, simulação

Diferentes espécies paramagnéticas, associadas a radicais  $\text{CO}_2^-$  com valência não usual, são produzidas pelas radiações ionizantes em carbonatos sintéticos e naturais. Em monocristais de calcita, observa-se a formação de espécies com simetria ortorrômbica ( $g=2.0032$ ,  $2.0018$  e  $1.9973$ ) e axial ( $g=2.0025$  e  $1.9975$ ), respectivamente. O espectro de RPE destas espécies é constituído por linhas com largura de  $0.2-0.25$  Gauss. Em amostras policristalinas de carbonatos naturais (conchas, corais e algas calcíticas e aragoníticas) irradiadas, observa-se espectros de duas espécies  $\text{CO}_2^-$  (simetria ortorrômbica) que apresentam linhas de RPE com largura de  $0.9$  Gauss e  $3.5$  Gauss, respectivamente. Neste trabalho, estudou-se espécies  $\text{CO}_2^-$ , produzidas pela radiação gama em amostras de corais, conchas e algas, pelas técnicas de RPE, ENDOR e Ressonância Tripla Geral. Medidas efetuadas em  $9.5$  e  $35$  GHz indicam que fatores tais como a distribuição dos fatores  $g$  não contribuem para o alargamento das linhas de RPE do radical. A espécie A, ( $\text{CO}_2^-$  com espectro constituído por linhas com largura de  $0.9$  Gauss) apresenta, em todas as amostras estudadas, um espectro de ENDOR formado por uma linha em  $14.4$  MHz, proveniente da interação hiperfina do spin eletrónico com prótons distantes (matriz). A espécie B ( $\text{CO}_2^-$  com espectro constituído por linhas com largura de  $3.5$  Gauss), apresenta um espectro de ENDOR complexo. Medidas de Ressonância Geral Tripla indicam que ele é formado por linhas hiperfinas devido à interação do elétron desemparelhado com prótons situados a  $5.1 \text{ \AA}$  ( $1.82$  MHz),  $5.3 \text{ \AA}$  ( $1.54$  MHz) e  $6.0 \text{ \AA}$  ( $1.14$  MHz) do radical. Simulações do espectro de RPE das espécies A e B foram realizadas com auxílio do programa QPOW, diagonalizando-se um hamiltoniano de spin constituído pelos termos Zeeman e de interação superhiperfina. O espectro experimental foi ajustado considerando-se que o elétron desemparelhado interage com  $6$  prótons ( $1.82$  MHz),  $8$  prótons ( $1.54$  MHz) e  $10$  prótons ( $1.14$  MHz), situados na vizinhança do radical. Estes resultados indicam que o alargamento de linha observado no espectro de espécies  $\text{CO}_2^-$  pode ser explicado por interações hiperfinas não resolvidas do elétron desemparelhado com prótons associados a águas de cristalização presentes neste materiais.

(CAPES)

## RMN DE COMPOSTOS DE LÍTIU INTERCALADOS:

$\text{Li}_x\text{MoS}_2$  e  $\text{Li}_{0.1}(\text{POE})_{1.04}\text{MoS}_2$

*N.C.Mello, F. B. Guedes, T.J.Bonagamba, H. Panepucci, J.P.Donoso,  
G.Gonzalez<sup>1</sup>, M.Santa Ana<sup>1</sup> e E. Benavente<sup>1</sup>*

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - CP 369, 13560-970, São Carlos, SP, Brasil  
<sup>1</sup>Facultad de Ciencias, Universidad de Chile - P.O. Box 653, Santiago, Chile

**Palavras-Chaves:** RMN Relaxação Intercalados

O  $\text{MoS}_2$  consiste de uma estrutura de camadas planas de S-Mo-S. A intercalação de íons ocorre no espaço entre os planos de  $\text{MoS}_2$ , em sítios octaédricos. A modificação do espaço interlaminar pela co-intercalação de poli(óxido-etileno) (POE) complexado com lítio resulta em amostras que apresentam maior difusão para o íon  $\text{Li}^+$ . Para investigar mobilidade e as interações do íon  $\text{Li}^+$  com o polímero e o  $\text{MoS}_2$  medimos larguras de linha,  $\Delta\nu$ , e tempos de relaxação spin-rede,  $T_1$ , em função da temperatura nas amostras  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$  ( $x=0.22$  e  $0.66$ ),  $\text{Li}_{0.1}(\text{PEO})\text{MoS}_2$  e o  $\text{PEO}_8\text{LiClO}_4$ . Mostraremos medidas de  $\Delta\nu$  e  $T_1$  para o  $^1\text{H}$  e  $^7\text{Li}$  obtidas entre  $150$  K a  $400$  K num campo de  $2T$ . As  $\Delta\nu$ 's do  $^7\text{Li}$  foram medidas com e sem desacoplamento de  $^1\text{H}$ . Os  $T_1$ 's do  $^7\text{Li}$  e  $^1\text{H}$  foram medidos utilizando inversão-recuperação. Os resultados da  $\Delta\nu$  do  $^7\text{Li}$  para  $\text{Li}_{0.1}(\text{PEO})\text{MoS}_2$  e  $\text{PEO}_8\text{LiClO}_4$  mostram um estreitamento em torno de  $253\text{K}$ , indicando que a mobilidade do íon é similar em ambos os sistemas. Uma diferença é observada na  $\Delta\nu$  residual em altas temperaturas, que é maior para os compostos intercalados, indicando uma contribuição que pode ter sido criada pela interação quadrupolar induzida pelo  $\text{MoS}_2$ . As medidas de  $T_1$  do  $^7\text{Li}$  e  $^1\text{H}$  mostram que a mobilidade do íon está relacionada com o movimento de cadeia polimérica. Para os sistemas  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$ , ocorre um estreitamento em uma temperatura mais baixa ( $\sim 223\text{K}$ ) e a  $\Delta\nu$  residual do  $^7\text{Li}$  é maior que nos casos anteriores. Isto sugere novamente a existência de interações quadrupolares devido a distorções nas vizinhanças dos enxofres. Na temperatura mais baixa investigada,  $170\text{K}$ , a  $\Delta\nu$  do  $^7\text{Li}$  é dominada pela interação dipolar para as amostras contendo polímero. No caso do  $\text{Li}_x\text{MoS}_2$  devemos considerar uma contribuição quadrupolar adicional criada por uma distribuição de gradientes de campo elétricos.

## Estudo por RPE das propriedades rotacionais do radical $\text{CO}_2^-$ com simetria isotrópica em carbonatos naturais.

*Delson Uhiratan da Silva Schramm e Alexandre Malta Rossi*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas.

*Palavras-chave:* rotação, radicais, carbonatos.

O sinal isotrópico ( $g = 2.0007$ ) observado em espectros de RPE de carbonatos de origem biológica e mineral irradiados é atribuído a radicais  $\text{CO}_2^-$ , providos de rotação [1]. Neste trabalho estuda-se as propriedades rotacionais destes radicais em carbonatos aragoníticos e calcíticos através da variação da largura de linha de RPE com a temperatura. As medidas de RPE foram efetuadas em frequências de microondas de 35 GHz, no intervalo de temperatura de 190 - 300 K onde o espectro do radical pode ser detectado. A curva de variação da largura de linha com a temperatura indica a existência de dois regimes de rotação do radical no intervalo de temperatura estudado. Entre 190-240 K e 240-300 K, observa-se um alargamento e um estreitamento da linha de RPE com a diminuição da temperatura que pode ser explicado por efeitos de modulação do tensor  $g$  do radical e pela interação spin-rede, respectivamente. Os dados experimentais foram ajustados com modelos analíticos desenvolvidos para radicais girando em sítios da rede cristalina [2] e em meios viscosos [3]. Pode-se verificar que ambos os modelos ajustam os dados experimentais. Entretanto, o melhor ajuste dos dados experimentais a partir do modelo de um radical girando em um meio viscoso foi obtido introduzindo-se a viscosidade da água na equação de Ayant et al. Este resultado reforça a hipótese de que estes radicais  $\text{CO}_2^-$  estão associados a moléculas de água sob a forma de inclusões na rede cristalina.

[1] Schramm D. U. and Rossi A. M. (1996). EPR, ENDOR and General Triple of Irradiated Biocarbonates. Applied Radiation and Isotopes. A ser publicado.

[2] Dattagupta S. and Blume M. (1974). Stochastic Theory of Line Shape. II. Nonsecular Effects in the EPR Spectrum of  $\text{CO}_2^-$  in Calcite. Phys. Rev. 10, 11, 4551.

[3] Ayant Y., Besson R. and Salvi A. (1975). Étude Expérimentale et Théorique de la Largeur des Raies R.P.E. du Tanone en Solution. J. Phys. 36, 571.

(CAPES)

## MEDIÇÃO DE POLUIÇÃO AMBIENTAL ATRAVÉS DE EPR PULSADA DE ÁCIDOS HÚMICOS

*Ney V. Vugman, Jose A. Coelho Neto, Lenise da Silva\* e Antonio S. Mangrich\**

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Centro de Tecnologia

Bloco A - 21945 / 970 - Rio de Janeiro - Brasil, e-mail: ney@if.ufrj.br

e \*Laboratório Regional Sul EPR - Departamento de Química - Universidade Federal do Paraná - Brasil, e-mail: labep@quimica.ufpr.br

*palavras-chave:* ressonância, relaxação, poluição

A espectroscopia por Ressonância Paramagnética Eletrônica no domínio do tempo está sendo utilizada para analisar amostras de ácidos húmicos extraídos de manguezais da região da Baía de Paranaguá, no estado do Paraná, Brasil. Amostras coletadas em pontos muito poluídos são comparadas a amostras coletadas no fundo do mar, em locais considerados não poluídos pela UNESCO.

Os tempos de relaxação spin-rede, relacionados ao sinal de radical livre em  $g=2$ , foram medidos a 4,8K por uma técnica de inversão e recuperação bi-dimensional. Esta técnica emprega um pulso  $\pi$  não seletivo (em relação a largura da linha CW) seguido por um pulso seletivo de  $\pi/2$  separados por um tempo variável. A magnetização é medida na amplitude máxima do FID. O campo magnético também é variado passo a passo para cada recuperação completa da magnetização, completando a experiência 2D. A contribuição dos sinais largos, devidos a metais de transição, é removida por filtragem e ajuste de linha de base.

Análise por CW-EPR e FT-IR revela que a interação orgânico-inorgânico é mais forte nas amostras não poluídas do que nas poluídas. Os tempos de relaxação spin-rede medidos são uma ordem de grandeza maiores para as amostras não poluídas. A taxa de relaxação é, portanto, muito mais efetiva para as amostras poluídas, sugerindo que as alterações geradas pela poluição modificam a vizinhança dos radicais livres e conseqüentemente seu acoplamento com a rede.

(FINEP, CNPq, FUJB, CEPG-UFRJ)

## RELAXAÇÃO SPIN-REDE ( $T_1$ ) DE PRÓTONS EM LIGAS METÁLICAS HIDROGENADAS $HfV_2H_{2.5}$ e $HfV_2H_{3.3}$

*Lincoln Bueno; Itamar José Moraes; Marco Antônio Sperb Leite; Nilson Mendes Borges  
e Waldemar Wolney Filho*

Departamento de Física da Universidade Federal de Goiás

*palavras-chave:* relaxação, difusão e ligas metálicas

Certas ligas metálicas tem capacidade de absorver uma grande quantidade de hidrogênio nas condições normais de temperatura e pressão, formando os chamados hidretos metálicos. Os mecanismos de difusão, e suas propriedades físicas correlacionadas, envolvendo o hidrogênio e outros ions leves em ligas metálicas não cristalinas tem sido objeto de estudo por diversos pesquisadores. Estes materiais são relativamente novos e constituem um vasto e importante campo na investigação científica. Na sequência de estudos de difusão de hidrogênio em ligas metálicas hidrogenadas, utilizando a técnica de RMN, foram efetuadas medidas de tempo de relaxação spin-rede de prótons em função da temperatura, nos compostos de  $HfV_2H_{2.5}$  e  $HfV_2H_{3.3}$ . Nestes materiais as medidas o tempo de relaxação  $T_1$  foram efetuadas no intervalo de temperatura de 180 a 430K. Estas amostras, bem como em outras investigadas, os mecanismos de relaxação dominantes são a interação dipolar e a interação hiperfina. Diferentemente das outras ligas metálicas hidrogenadas estudadas, as amostras com Háfnió-Vanádio apresentam um acoplamento do momento magnético hidrogênio-metal não desprezível, devido ao momento magético relativamente grande do Vanádio(51). Além disso os dados experimentais sugerem a existência de uma grande contribuição hiperfina devido aos elétrons de condução em baixas temperaturas bem como uma possível mudança de fase estrutural para uma temperatura em torno de 300K.

(CNPq, FUNAPE-UFG)

## ESTUDO DO DESDOBRAMENTO QUADRUPOLEAR DO COMPOSTO $(NH_4)_2FeF_6 \cdot H_2O$

*Luciana Kazumi Hanamoto e Carmen Silvia de Moya Partiti*

Depto. de Física dos Materiais e Mecânica do Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

*Palavras-Chave:* amônio, composto, desdobramento quadrupolar.

Medidas de Espectroscopia Mössbauer do composto  $(NH_4)_2FeF_6 \cdot H_2O$  foram feitas em temperaturas variando de 80 K a 340 K. Os desdobramentos quadrupolares medidos apresentaram dependência com a temperatura e esse comportamento foi também observado em outros sais envolvendo o ion amônio. O modelo semi-empírico para esses compostos[1], baseado na hipótese de rotação do ion amônio, foi originalmente proposto para RQN e adaptado para o desdobramento quadrupolar[2]:

$\Delta(T) = (\Delta_0 + \Delta_f) - ((\Delta_i - \Delta_f) / ((\tau_0/\tau_f) \exp(E_a/k_B T) + 1))$ , onde,  $\Delta_0$  é a contribuição de todos os vizinhos exceto o ion amônio;  $\Delta_i$  é a contribuição da posição inicial de equilíbrio do ion amônio;  $\Delta_f$  é a contribuição da posição de equilíbrio final do ion amônio;  $\tau_0 \exp(E_a/k_B T) = \tau_f$  é o tempo médio de permanência na posição de equilíbrio;  $E_a$  é a energia de ativação;  $\tau_f$  é o tempo médio gasto em rotações a partir da posição de equilíbrio. Para o composto de flúor estudado, obtivemos energia de ativação maior e  $\tau_0/\tau_f$  menor que os compostos de cloro[2]. Esses resultados estão coerentes com o fato do ion fluoreto possuir raio iônico menor e, conseqüentemente, distâncias entre os vizinhos menores. Assim as forças de ligação são maiores no composto com flúor que no composto com cloro, o que explica uma energia de ativação maior. Supondo  $\tau_0$  constante comparando a razão  $\tau_0/\tau_f$  para os vários compostos teremos, no caso do composto do flúor, provavelmente um tempo gasto em rotações maior.

[1] K. Negita, N. Nakamura and H. Chiara. Chem. Phys. Letters, 63, 187 (1979).

[2] C. S. M. Partiti, H. R. Rechenberg. Hyperfine Interactions, 83, 411 (1994).

(CNPq)

## DETERMINAÇÃO DA DIREÇÃO DO EIXO PRINCIPAL DO GCE

*Hernán Cervantes R. e Said R. Rabbani.*

Instituto de Física da USP

*Christovam Mendonça Filho*

Departamento de Física UFSCar

*Palavras-Chave:* rqn, imagem, mem

A técnica de RQN em duas dimensões tem sido usada para diferentes aplicações como determinação do parâmetro de assimetria,  $\eta$ , em amostras policristalinas contendo núcleos com spin  $3/2$ , obtenção de imagens através de RQN, etc. Neste trabalho mostramos como esta mesma técnica pode ser usada para determinar a orientação do eixo principal do gradiente do campo elétrico nas coordenadas cristalográficas nas amostras monocristalinas ou das orientações preferenciais no caso das amostras policristalinas, onde os monocristais não têm distribuição uniforme.

O método se baseia na obtenção do pseudo-FID (O gráfico da amplitude do sinal versus a duração dos pulsos de excitação) e consequente uso do Método da Máxima Entropia para obtenção da orientação ou distribuição das orientações da direção do eixo principal do GCE.

A viabilidade do método foi comprovada através de simulações numéricas para distribuições gaussianas da orientação do eixo principal do GCE em torno dos ângulos pré-fixados. Neste caso a resolução angular na determinação da direção do eixo principal do GCE foi melhor do que  $5^\circ$ .

O método é dependente do valor da frequência de nutação a qual tem que ser calculada separadamente pela utilização de amostras policristalinas, ou seja, amostras com distribuição uniforme do eixo principal do GCE.

Amostra de clorato de sódio ( $\text{NaClO}_3$ ) monocristalino crescido por solução saturada foi utilizada para a comprovação experimental, sendo que os resultados obtidos são compatíveis com os dados cristalográficos disponíveis para esta amostra. O valor da frequência de nutação foi calculado pelo método de ajuste por mínimos quadrados do pseudo-FID de amostra policristalina do mesmo material.

(CNPq)

## APLICAÇÕES DA TÉCNICA DE SUPRESSÃO DE BANDAS LATERAIS ATRAVÉS DE ROTAÇÃO DA AMOSTRA EM ÂNGULO MÁGICO COM FREQUÊNCIA VARIÁVEL

*E. A. Vidoto, T. J. Bonagamba, H. Panepucci e E. L. G. Vidoto.*

Departamento de Física e Informática, Instituto de Física de São Carlos,  
Universidade de São Paulo.

*Palavras-Chaves:* bandas laterais, ângulo mágico, ecos rotacionais

Em experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) com Rotação da Amostra em Torno do Ângulo Mágico (MAS), as bandas laterais são um problema comum na obtenção de espectros de alta resolução em sólidos. Embora estas bandas possam ser utilizadas para se obter maiores informações sobre a amostra estudada, após elas terem sido identificadas, é necessário eliminá-las para simplificar a interpretação dos espectros de alta resolução em sólidos. Com esse objetivo, desenvolvemos um método simples de supressão das bandas laterais, através da variação da frequência de rotação da amostra durante todo o processo de aquisição do sinal. Para controlarmos a frequência de rotação da amostra, utilizamos um motor de passo, acoplado à uma válvula de agulha, inserida na linha de fluxo de gás comprimido que vai promover a rotação da amostra. Este método que denominamos VIABLE, baseia-se na dependência da posição das bandas laterais com a frequência de rotação, reduzindo as coincidências entre suas posições durante a promediação do sinal, enquanto o sinal isotrópico permanece estável, sempre na mesma posição do espectro. Para ilustrar esse novo método, realizamos experimentos de RMN com o núcleo  $^{13}\text{C}$  em amostras de hexametilbenzeno, tirosina, lignina e ácido húmico, e com o núcleo quadrupolar  $^{79}\text{Br}$  em amostras de KBr e NaBr+KBr. Este novo método não envolve cálculos entre os sinais adquiridos individualmente e, a relação sinal/ruído e a resolução das bandas laterais não representam uma limitação à sua aplicação. Além disso, desde que a supressão das bandas laterais ocorre simultaneamente ao processo de promediação do sinal de RMN, o tempo necessário para obtenção do espectro livre de bandas laterais é equivalente àquele requerido para obter um único espectro com bandas laterais em uma dada frequência  $\omega_R$ , com uma similar relação sinal/ruído.

## RESONANCIA CUADRUPOLAR EN EL 1-2-3-TRICLOROPROPANO

*L. Vega, G. Monti, M. Zuriaga, C. Martín*

Facultad de Matemática, Astronomía y Física (Fa.M.A.F.) -Universidad Nacional de Córdoba-  
República Argentina

*Palavra-Chave:* espectro-resonancia-tcp

En este trabajo se ha realizado un análisis exhaustivo del 1-2-3-tricloropropano (TCP) por la Resonancia Cuadrupolar Nuclear (RCN) en la fase cristalina, estudiándose la dependencia con la temperatura de la FRCN, el ancho de línea ( $\Delta\nu$ ) y los tiempos de relajación espín-red ( $T_1$ ) y espín-espín ( $T_2$ ) en el rango de temperatura que va desde los 77°K y el punto de fusión de dicho compuesto. Las mediciones se realizaron con un Espectrómetro Pulsado con Transformada Rápida de Fourier que opera en el rango de 25 a 45 Mhz. En este compuesto y en todas las líneas, el comportamiento de  $T_1$  con la temperatura muestra dos regiones bien diferenciadas. En la zona de bajas temperaturas,  $T_1$  se comporta normalmente, por encima de esa temperatura ocurre un rápido acortamiento de  $T_1$  indicando la presencia de un proceso térmicamente activado. Los datos experimentales de  $T_2$  y ( $\Delta\nu$ ) muestran que son aproximadamente constantes a baja temperatura, y con el aumento de la temperatura se produce un acortamiento de  $T_2$  el cual induce un incremento del ancho de línea. Los resultados del análisis térmico diferencial muestran la existencia de un estado vítreo con una temperatura característica de  $T_g = 146^\circ\text{K}$  en el TCP. De los resultados obtenidos se observa la presencia de movimientos moleculares térmicamente activados, por ejemplo reorientaciones de la molécula o de los grupos  $\text{CH}_2\text{Cl}$  externos. La determinación clara de dos energías de activación indicaría la existencia de dos modos independientes, uno de ellos presentes a partir de 190K, y esta relacionada con la reorientación de uno de los grupos terminales. La energía de activación de los otro dos grupos sugiere que a partir de 220K la molécula se reorienta como un todo.

( CONICET, CONICOR y SECYT UNC )

## PURIFICAÇÃO E CRESCIMENTO DE IODETO DE MERCÚRIO NA FASE ALFA

*Érika Regina Manoel, Antonio Carlos Hernandez, José Pedro Andreetta*

Depto. de Física e Ciência dos Materiais, Inst. de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

*Palavras-chave:* crescimento de cristal, iodeto de mercúrio, detector de radiação ionizante

Iodeto de mercúrio na fase alfa é um material semicondutor com interessantes aplicações em detectores e espectrômetros de radiações ionizantes, no intervalo de 0.5 keV - 1MeV, e sensores com resposta rápida para pulsos de luz. Entre os detectores nucleares semicondutores, o  $\alpha$ -HgI<sub>2</sub> apresenta a vantagem de operar à temperatura ambiente livre de ruído térmico, devido ao grande tamanho de sua banda proibida (2.1 eV). Outros materiais semicondutores (Si, Ge, GaAs) com suas bandas menores devem ser usados à temperatura do nitrogênio líquido para comparável desempenho. Dependendo da aplicação, a refrigeração de dispositivo pode ser tecnicamente difícil, cara e limitante da resolução local. O sucesso do crescimento de grandes monocristais de  $\alpha$ -HgI<sub>2</sub> de alta qualidade, para o propósito de confecção de detectores de radiação ionizante, é fortemente dependente da qualidade e da purificação do material de partida. Impurezas orgânicas, na forma de carbono e hidrocarbonetos, estão sempre presentes neste material e são incorporadas no cristal durante o processo de crescimento, deteriorando as propriedades eletrônicas do iodeto de mercúrio. O processo de purificação desenvolvido envolve a técnica de sublimações repetidas a vácuo. A vantagem desta técnica é que a impureza apresenta uma pressão de vapor baixa a temperaturas da ordem de 100°C, ocorrendo exatamente o contrário com o  $\alpha$ -HgI<sub>2</sub>. Para hidrocarbonetos, esta condição nem sempre é satisfeita. Neste procedimento, a ampola selada é submetida a uma diferença de temperatura da ordem de 130°C, sendo que a região de sublimação é envolvida em um forno resistivo, o que não ocorre com a região de condensação. Em todas as ampolas submetidas ao processo de purificação, o resultado obtido foi o surgimento de cristais na parte superior e a presença de um resíduo negro na parte inferior. A ampola evacuada, contendo o material purificado, é então posicionada em um forno de pyrex transparente, o qual permite a visualização do processo de crescimento dos monocristais. Os monocristais obtidos apresentaram morfologia bem definida e livres de inclusões macroscópicas.

Agradecimentos: FINEP, CNPq e CAPES.

## PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE ÓXIDOS $\text{Pr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_{3-y}$ ; $0.0 \leq x \leq 0.5$

*Carlos Henrique Cohenca e Renato de Figueiredo Jardim*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C. P. 66318, 05389-970, São Paulo, Brasil

*Palavras-Chave:* sol-gel, perovskita, difusão

O fenômeno da magnetoresistência gigante tem sido observado em óxidos ferromagnéticos metálicos do tipo  $\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_{3-y}$ ; Ln = La, Pr, Nd; A = Ca, Sr, Ba, Pb; que apresentam estrutura do tipo perovskita. As propriedades ferromagnéticas e metálicas nestes compostos estão relacionadas com as interações entre pares de íons  $\text{Mn}^{4+}$  e  $\text{Mn}^{3+}$ . O controle do número destes pares envolve: (1) a variação da concentração do dopante  $\text{A}^{2+}$ , que substitui o lantanídeo  $\text{Ln}^{3+}$ ; e (2) alteração na concentração de oxigênio. Neste trabalho, estudamos a difusão do Ba em amostras policristalinas de  $\text{Pr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_{3-y}$ ;  $0.0 \leq x \leq 0.5$ . Estas foram produzidas a partir de dois procedimentos diferentes: (1) mistura de  $\text{Pr}_6\text{O}_{11}$ ,  $\text{MnCO}_3$  e  $\text{BaCO}_3$ ; e (2) através de precursores sol-gel. As amostras foram tratadas ao ar e em temperaturas até 1100 °C. A cinética de formação da fase foi acompanhada por medidas de difração de raios-x. Após a sinterização, as amostras foram prensadas e submetidas a tratamento térmico em oxigênio e caracterizadas por medidas de resistividade elétrica,  $\rho(T)$ ; 77 K  $\leq T \leq$  300 K. Os resultados de raios-x revelaram a presença de uma fase adicional  $\text{BaMnO}_3$  nas amostras produzidas por mistura de óxidos e tratadas a 1100 °C por 40 h, fase que não foi observada naquelas produzidas através de precursores sol-gel. Isto indica que a difusão do Ba em  $\text{PrMnO}_3$  é mais efetiva nos materiais produzidos por sol-gel. As medidas de resistividade mostraram que  $\rho(T)$  cresce com o decréscimo da temperatura até atingir um valor máximo em  $\approx$  160 K. Abaixo desta temperatura,  $\rho(T)$  decresce monotonicamente. A forma da curva de  $\rho(T)$  não depende da corrente de excitação aplicada na amostra, mas seu valor máximo desloca-se para temperaturas maiores com o aumento da concentração de Ba.

(FAPESP, CNPq)

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA INSTABILIDADE CONSTITUCIONAL DURANTE CRESCIMENTOS DE PbSnTe e HgCdTe EM AMPOLAS FINAS

Maurício Fabbri<sup>1</sup>

Núcleo de Desenvolvimento Tecnológico - NDT  
Universidade São Francisco - USF

**Palavras-Chave:** Bridgman, Cristais, Solidificação

A solidificação Bridgman de cristais binários ou pseudo-binários em ampolas finas minimiza os efeitos da convecção na fase líquida, permitindo a obtenção de um regime quasi-difusivo de crescimento. Para se evitar a instabilidade constitucional, é necessário que o gradiente térmico efetivo na interface líquido-sólido seja proporcional à velocidade de crescimento (que é igual à velocidade de deslocamento do forno, no regime estacionário). Tipicamente, para cristais de PbSn-PbTe, crescidos a 10mm/h em ampolas de 2mm de diâmetro, exige-se um gradiente térmico efetivo de pelo menos 50°C/cm. O perfil térmico de equilíbrio do forno, na zona adiabática, deve na verdade prover um valor significativamente maior do que este, devido à diferença de condutividade térmica entre a ampola, a fase sólida (cristal), e a fase líquida (melt). Neste trabalho, apresentamos um modelo numérico baseado nas equações de transporte, em regime de quasi-equilíbrio, apropriado para a previsão da largura da zona de instabilidade ("mushy-zone"), em função dos parâmetros físicos e geométricos de crescimento (condutividades térmicas da ampola, cristal e melt, diagrama de fase do material, espessura da ampola, perfil térmico do forno, e velocidade de deslocamento mecânico). Os resultados indicam que a região de instabilidade é significativamente maior do que a prevista pelo modelo térmico simplificado de Tiller, e permitem projetar adequadamente experimentos controlados para a recuperação de constantes físicas do material durante o crescimento (tais como a taxa de segregação interfacial e de difusão mútua). O método, quando aplicado a cristais de diâmetro 1-2cm (simulação bidimensional em ausência de convecção, pertinente a experimentos levados a efeito em ambiente de microgravidade), mostra que a instabilidade constitucional originada no eixo do cristal domina o comportamento do perfil radial de segregação observado no trecho de crescimento estacionário.

(FAPESP, IPPEX/USF)

<sup>1</sup>Endereço permanente: Laboratório Associado de Sensores e Materiais (LAS), Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE). e-mail: [fabbri@las.inpe.br](mailto:fabbri@las.inpe.br)

## CRESCIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CRISTAIS DE TELURETO DE CÁDMIO

Kassilio José Guedes, Luiz Orlando Ladeira e Karla Balzuweit

Departamento de Física - Instituto de Ciências Exatas  
Universidade Federal de Minas Gerais

**PALAVRAS-CHAVE:** CdTe, estequiometria, Bridgman

O crescimento de cristais de telureto de cádmio ( CdTe ) utilizando a técnica Bridgman Vertical foi estudado neste trabalho. O principal objetivo foi o de desenvolver experimentos de crescimento de cristais de CdTe enfocando principalmente aspectos relacionados qualidade e perfeição cristalina. Um dos principais problemas no crescimento do CdTe é a evaporação incongruente do CdTe no volume vazio da ampola acima do líquido, isto é suficiente para modificar significativamente a estequiometria do CdTe enriquecendo-o com telúrio. O crescimento de CdTe não-estequiométrico é próximo do regime de instabilidade constitucional na interface sólido-líquido, sendo este um dos maiores problemas no crescimento da fase líquida deste material. A maioria dos trabalhos sobre o crescimento de cristais de CdTe procuram evitar este desvio na estequiometria fazendo uso de uma sobrepressão de Cd na ampola. Este procedimento não tem apresentado bons resultados, provavelmente pela dificuldade da fase líquida e vapor entrarem em equilíbrio. Neste trabalho, desenvolvemos um novo procedimento para o crescimento estequiométrico deste material. O material de partida é enriquecido com Cd via tratamento térmico em atmosfera de Cd, de forma a difundir no sólido um excesso de Cd compensando a evaporação no momento da fusão. Desta maneira, quando o material é fundido a fase líquida entra rapidamente em equilíbrio com a fase vapor, mantendo-a muito próximo composição estequiométrica. Um dos cristais crescidos por este método apresentou-se com alta resistividade elétrica e quase monocristalino em toda sua extensão, características estas dificilmente obtidas pelas outras técnicas de controle da estequiometria no crescimento deste material.

(CNPq)

## O CRESCIMENTO DE CRISTAIS E DESENVOLVIMENTO DE NOVOS MATERIAIS PELO METODO HIDROTHERMAL

SCHETTERT, P. G. ; WATANABE, S.  
Instituto de Física - USP

*Palavras-Chave* : hidrotermal , quartzo , zirconia

A síntese hidrotermal refere-se a processos que ocorrem dentro de autoclaves a temperaturas e pressões relativamente altas na presença de água. Os equipamentos para experimentos hidrotermais são vasos para pressões elevadas e trabalho em alta temperatura. Nosso experimento foi feito em uma autoclave projetada para operações da ordem de 5000 atm e temperatura de 500°C onde foram feitas sínteses de monocristais de quartzo e nanocristais de zirconia(pó). O quartzo é um material com uma transição de fase sólido-sólido de alfa para beta que ocorre a 573°C, este é o principal motivo para sua síntese em meio hidrotermal, as condições de operação para a síntese do quartzo foram de 400°C com um gradiente de 20°C e pressões de 2000atm, foi usado como mineralizador (solvente) 1 molar de hidróxido de sódio o qual promove um aumento da solubilidade do quartzo, os cristais crescidos foram caracterizados por microscopia eletrônica de varredura e difração de raio-x. Pós cerâmicos avançados altamente cristalinos e a temperaturas relativamente baixas tem sido obtidos em estudos de sistemas de óxidos e o processo envolve a dissolução e precipitação de um material ou um precursor químico do produto final. A zirconia foi obtida pelo método hidrotermal em condições de pressão, temperatura e tempo de crescimento distintos também as condições de preparação do material a ser submetido ao tratamento hidrotermal, partindo-se inicialmente de hidróxido de zirconia a 300°C e 900atm durante 4 horas, 250°C e 1000atm por 7,5 horas e um precipitado de oxiclreto de zirconia com hidróxido de amônia que foi submetido a 250°C por 19 horas a pressão de 1000atm, todas as amostras foram caracterizadas por difração de raio-x e obtidas as estruturas cristalinas monoclinica e tetragonal.

(CNPQ)

## MUDANÇA NA FORMA DA INTERFACE SÓLIDO-LÍQUIDO E ESTRIAS DE CRESCIMENTO EM CRISTAIS DE $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$

Jesiel F. Carvalho, Antonio C. Hernandez, José P. Andreeta, M. Siu Li

Depto. de Física e Ciência dos Materiais, Inst. de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

*Palavras-chave*: cristal sillenita, bto, óxido de bismuto e titânio

Os cristais de  $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$  (BTO) são eletroópticos, opticamente ativos e fotocondutivos. A resposta fotorrefrativa rápida e a relativamente alta eficiência de difração fazem com que o BTO seja bastante adequado como meio ativo para processamento óptico de sinal e holografia dinâmica. Seu crescimento, no entanto, apresenta características que dificultam a obtenção de cristais com boa qualidade óptica. Os cristais por nós preparados foram puxados a partir de solução em excesso de óxido de bismuto. A distribuição de temperatura axial e radial do forno de crescimento foi investigada e o gradiente de temperatura na interface sólido-líquido (para a condição de crescimento estacionário e interface plana) foi estimado entre 16 e 21 °C/cm. A evolução na forma da interface foi estudada através de cristais cortados e polidos. Estrias de crescimento são um problema presente na preparação de um grande número de cristais óxidos. Sua origem tem sido associada a oscilações de temperatura devidas a processos convectivos na fase líquida resultando em variações de composição do cristal. Nossos registros de temperatura mostram que as oscilações típicas são menores que 0.3°C, mas em algumas condições, oscilações com período bem definido e amplitude de alguns graus podem surgir e desaparecer de maneira estocástica. Como consequência, uma relação simples entre a frequência espacial das estrias (5 a 200µm) e a frequência temporal das oscilações térmicas (5 a 30 minutos) não pôde ser estabelecida. No crescimento do BTO encontramos sempre uma transição na forma da interface de convexa para planar e levemente côncava. Nossos resultados mostram que a transição depende não só do diâmetro mas do volume do cristal. Com este estudo foi possível estabelecer condições que antecipem a transição na forma da interface e possibilitando que o corpo principal do cristal apresente qualidade óptica conveniente para as aplicações ópticas, como indicam nossas medidas de fotocondutividade, absorção óptica, coeficiente eletroóptico e atividade óptica.

(FINEP, CNPq, CAPES)

## LAP SINGLE CRYSTALS GROWTH FREE OF MICROBES AND FUNGII BY ACCURATELY CONTROLLED SOLVENT EVAPORATION TECHNIQUE

*Liana B.O.A. de Moraes, Jesiel F. Carvalho, Antonio C. Hernandez, Frederico D. Nunes, Lino Misoguti, José P. Andreetta, Vanderlei S. Bagnato, Sérgio C. Zilio*

Depto. de Física e Ciência dos Materiais, Inst. de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

**Keywords:** crystal growth, organic crystals, aminoacid

L-arginine phosphate monohydrate ( $C_6H_{14}N_4O_7H_3PO_4 \cdot H_2O$ ), known as LAP is a highly transparent monoclinic crystal with attractive properties for efficient frequency conversion of infrared lasers. LAP has been proposed to replace KDP in many applications, especially those with high power lasers, due to their high nonlinearity properties, high damage threshold and low level of hygroscopicity. However, being L-arginine an amino acid it is a very good biological nutrient to microbes and fungii. Therefore, solutions of LAP is a natural reservoir of food to these microorganisms stimulating the development of colonies in the crystal growth chamber and leading to problems associated with the presence of fungii during the growth of crystal such as the coloration of the solution and reducing the quality of the crystals grown. We report the growth of good LAP single crystals in solution prepared with a new chemical doping, namely azide,  $NaN_3$ , being free of any fungii and microbes colonies during a long time (up to six months) with no solution maintenance. The crystals were grown with isothermal solvent evaporation method, using an accurately controlled solvent evaporation technique (ACSET). Good crystals, highly transparent and with defined morphology were obtained and no significant change in the kinetics of crystal growth was verified. In general, our crystals exhibits {100}, {101} and {111} faces. In order to verify the quality of our crystals, as well to verify if the dopant caused any change in their optical properties, we measured absorbance, refractive index and second harmonic generation (SHG). The results showed that our LAP crystals are 2.5 times more efficient than KDP. All optical results obtained with the LAP crystals grown using azide as fungicide indicate that no detectable physical change had been occurred. This fact suggests that azide besides the improvement on the crystal growth by avoiding with a simple procedure the development of fungii colonies in the solution also does not cause any modification on the crystals grown.

(FINEP, RHAIE e CNPq)

## ESTUDO DA CINÉTICA DE FORMAÇÃO DA FASE MULITA EM AEROGÉIS DE $Al_2O_3-SiO_2$ ATRAVÉS DE ANÁLISE TERMOMEICÂNICA

*Dorotéia F. Bozano e Angela A. S. T. Delben*

Departamento de Física /CCET- Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

**Palavras-chave:** Mulita, Análise Termomeicânica, Cinética de Formação

A mulita é um mineral natural raro. Devido às suas excelentes características termomeicânicas, a mulita tem sido produzida sinteticamente. Dentre os processos estudados para sua obtenção destacamos o processo sol-gel. Dependendo dos precursores utilizados e/ou do método de manipulação, os géis obtidos são classificados como poliméricos ou coloidais em função da escala da homogeneização dos precursores. A reação de cinética de formação da fase mulita é afetada por esta escala de homogeneização. Neste estudo, análises termomeicânicas (TMA) e análises termomeicânicas diferencial (DTMA) foram utilizadas para caracterizar a cinética de formação da fase mulita ( $74\%Al_2O_3-26\%SiO_2$ ) em géis poliméricos e coloidais. Os precursores utilizados foram  $Al(OC_2H_5)_3$  e  $Si(OC_2H_5)_4$ . Os géis poliméricos foram obtidos pela dissolução destes alcóxidos em isopropanol, acetilacetona, sendo que a água para a hidrólise foi obtida da atmosfera ambiente. Nos géis coloidais, os precursores foram hidrolisados em excesso de água acidificada. Os géis foram secados por extração supercrítica com  $CO_2$ , calcinados a  $600^\circ C/16h$ , moldos em moinho de ágata e peneirados (270 MESH). Os corpos cerâmicos foram obtidos por prensagem uniaxial ( $2,5 \text{ Ton/cm}^2$ ) e apresentavam densidades a verde de  $1,3$  e  $1,2 \text{ g/cm}^3$ , respectivamente. As análises de TMA foram realizadas entre  $25$  a  $1400^\circ C$ , com taxa de aquecimento de  $10^\circ C/min$ , em atmosfera de ar, com carga de  $10g$ . Estas análises apresentam retrações de  $25\%$  para os géis poliméricos e de  $22\%$  para os coloidais. As análises DTMA para os géis poliméricos indicam a presença de um pequeno pico em torno de  $1000^\circ C$  e um grande pico estreito centrado em  $1340^\circ C$ . Para os géis coloidais, esta análise apresenta um pico largo de baixa intensidade que se desenvolve deste  $830^\circ C$  até  $1080^\circ C$  e um segundo pico intenso centrado em  $1300^\circ C$ . Estes resultados indicam as diferenças na cinética de formação da fase mulita em função da diferença de homogeneidade dos materiais precursores.

(PROPP-UFMS e CECITEC-MS)

## DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA DE ANÁLISE DA QUALIDADE CRISTALINA DE MONOCRISTAIS

*Sabrina Metairon, Vera L. Mazzocchi, Carlos B.R. Parente e Sonia L. Baldochi*

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

*Thierry Lemaire*

Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia

**Palavras-Chave:** qualidade cristalina, difração de nêutrons, varreduras  $\omega$

O estudo da qualidade cristalina macroscópica de um monocristal pode ser feita a partir de curvas de "rocking" (varreduras  $\omega$ ), obtidas com difração de nêutrons de várias reflexões em diferentes direções. Diferentemente da técnica de difração de raios-X, a difração de nêutrons permite observar toda a massa cristalina de uma só vez. Com difração de raios-X, dada as pequenas dimensões da seção transversal do feixe, somadas à grande absorção dessa radiação pela matéria, torna-se difícil a observação de mais de um domínio cristalino simultaneamente. O presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de uma metodologia para o estudo da qualidade cristalina de monocristais, utilizando a técnica de difração de nêutrons, com a determinação do número de domínios cristalinos, de suas larguras angulares intrínsecas, de seus volumes relativos ao volume total do cristal e dos desvios angulares entre eles. Para isso, foram obtidas curvas de "rocking" tridimensionais ( $I \times \omega \times \chi$ ), uma vez que uma única curva  $I \times \omega$  pode não mostrar todos os domínios existentes na amostra. Foram estudados dois cristais de BaLiF<sub>3</sub> e um cristal de LiF, selecionados de forma a mostrar casos com diferentes qualidades cristalinas. O ajuste de gaussianas às curvas individuais  $I \times \omega$ , que compõem o conjunto de curvas de um gráfico tridimensional, seguido da deconvolução da largura experimental, permitiu que cada gráfico tridimensional pudesse ser construído de forma a representar os domínios com suas larguras intrínsecas. A partir deles foram calculados os valores para os três primeiros parâmetros acima citados. As distâncias angulares entre os domínios foram obtidas de mapas de contorno, projetados sobre a base do gráfico tridimensional.

(International Atomic Energy Agency - IAEA e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq).

## ESTUDO EXPERIMENTAL DA EXPANSÃO DE VAPOR DE URÂNIO METÁLICO GERADO PELO BOMBARDEAMENTO DE UM ALVO SÓLIDO POR CANHÃO DE ELÉTRONS.

*Getúlio de Vasconcelos, Nicolau A. S. Rodrigues, Alvaro J. Damião*

Instituto de Estudos Avançados/CTA - São José dos Campos - SP

**Palavras-Chave:** canhão de elétrons, urânio, evaporação

No processo de separação isotópica via lasers, o vapor de urânio é gerado pelo aquecimento de um alvo sólido por um canhão de elétrons, por sua vez, este vapor é iluminado por feixes de laser com comprimentos de onda convenientemente escolhidos para promover a ionização seletiva do isótopo <sup>235</sup>U e posteriormente os íons são coletados usando-se um campo eletrostático. O processo de geração de vapor é crítico não somente porque altas densidades de vapor são necessárias no processo de separação isotópica via lasers, mas também porque é necessário ter conhecimento da distribuição da densidade de vapor na câmara de evaporação, para melhor dimensionar o arranjo experimental da coleta. Neste trabalho será mostrado os resultados preliminares obtidos do comportamento de expansão do fluxo do vapor de urânio e toda a seqüência de trabalho desprendida no processo de entendimento desta expansão. O trabalho será apresentado em duas fases distintas, no primeiro caso, faz-se o estudo através da coleta de urânio metálico em diferentes pontos dentro da câmara de evaporação com o auxílio de um conjunto de coletores composto de lâminas de alumínio, dispostas em posições previamente conhecidas e posteriormente é verificado a taxa de absorção de um determinado comprimento de onda pelo vapor desta vez utilizando um laser de corante bombeado por um laser de vapor de cobre sintonizado na linha 5915 Å.

## MICROSCOPIC CHARACTERIZATION OF OVAL SHAPED DEFECTS IN ORGANOMETALLIC VAPOR PHASE EPITAXY GALLIUM INDIUM PHOSPHIDE LAYERS.

Ricardo Benetton Martins, Antonio Sachs, Aldionso Marques Machado,  
and Cristina F. de Souza

CPQD-TELEBRAS, Campinas SP

*keywords:* epitaxial growth, lattice defects, growth characterization

Recently, the performance of optoelectronic devices has been improved by using GaInP ternary alloys as an alternative materials for GaAlAs ones. One of the suitable devices to be improved by this substitution are InGaAs/GaAs/GaInP heterostructure lasers which are of high technological importance for fabrication of lasers operating at the wavelength of 980 nanometers, used for pumping erbium-doped optical-fiber amplifiers. In spite of some GaInP characteristics being quite better in comparison with the GaAlAs alloy, namely the absence of deep level DX centers and the very low surface recombination rate ( $< 1.5$  cm/s), the commercial 980 nm lasers are still fabricated using GaAlAs as confining layers. The main reason for this seems to be the anomalous defect formation that occurs during the GaInP growth which are very difficult to be avoided. In this work we used spectrally resolved cathodoluminescence and X-ray Microanalysis to characterize these defects and to give an interpretation for their origin. The observed defects are aligned along the  $\langle 110 \rangle$  direction that lies in the (100) plane, and their morphology are very similar to the so called "oval shaped" defects, commonly observed in MBE growth. The same explanation proposed for the formation of these oval-shaped defects - presence of a metal droplet that lies on the substrate surface or at the grown surface resulting in dissolution pits - applies to MOCVD growth too. However, in MOCVD case, it is related with furnace contamination or growth velocity.

## LUMINESCÊNCIA DE PEQUENAS PARTÍCULAS DE SILÍCIO HIDROGENADO

Rogério J. Baierle<sup>1</sup> Marília J. Caldas<sup>1</sup> E. Molinari<sup>2</sup> e S. Ossicini<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do IFUSP - <sup>2</sup> Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena (Italia)

*Palavras chave:* luminescência - cluster - silício poroso

Em recentes trabalhos apresentamos o espectro de absorção ótica para pequenas partículas de silício saturadas por hidrogênio. Agora estamos apresentando o espectro de emissão para essas mesmas partículas. Utilizamos os métodos semiempíricos da Química Quântica, em especial estivemos trabalhando com o método MNDO-AMI para obtenção de geometrias e o método INDO na versão espectroscópica para obtenção do espectro ótico. Ambos os métodos foram modificados e reparametrizados por nós para reproduzir a geometria e o espectro eletrônico de pequenas moléculas e as principais características estruturais e eletrônicas do cristal de silício ( como o espectro de fônons e o valor e o caráter do gap fundamental).

O cálculo do espectro de absorção nos permite reconhecer a primeira excitação ótica como predominantemente monoelétrica, e oriunda da transição HOMO-LUMO. O decaimento ótico a partir deste estado excitado foi agora calculado, permitindo a relaxação estrutural ( de novo com a combinação AMI + INDO).

Nossos resultados mostram a possibilidade de um Stokes Shift da ordem de 1.2 eV para estas pequenas partículas ( $\text{Si}_3\text{H}_6$ , diâmetro de  $\sim 11$  Å ), com a emissão localizada na região do laranja, em concordância com o espectro de emissão de amostras de silício poroso. É interessante notar que a emissão ocorre na mesma faixa de energia e com características muito semelhantes para diferentes partículas.

(FAPESP)

## PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DE IMPUREZAS DE OXIGÊNIO EM SILÍCIO

Rogério J. Baierle e Marília J. Caldas.  
Departamento de Física dos Materiais e Mecânica do IFUSP.

*palavras chave: Silício - Oxigênio - Estrutural e Eletrônica - centro A.*

A impureza de oxigênio em Silício é conhecida por introduzir muitos tipos de defeitos na rede. Em 1961 Watkins e Corbett identificaram o nível aceitador, localizado a 0,17 eV abaixo do fundo da banda de condução do Si, como correspondente a uma impureza de oxigênio, em um sítio intersticial, ligada a uma vacância da rede. Esse defeito é costumeiramente conhecido como centro A em Si, e é muito estudado do ponto de vista teórico. Neste trabalho apresentamos o cálculo das propriedades estruturais e eletrônicas para esse defeito, utilizando um modelo proposto por nós para o estudo de estruturas semicondutoras complexas. O modelo utiliza ambas as descrições, de cristal periódico e de "cluster" saturado, para resolução das equações de Hartree-Fock-Roothaan. Como técnicas específicas adotamos os métodos semicméricos da Química Quântica: para cálculos de geometria usamos o método MNDO-AM1 e para cálculos da parte eletrônica usamos o método INDO espectroscópico. Ambos os métodos foram totalmente reparametrizados, para reproduzirem não apenas as propriedades estruturais e eletrônicas de pequenas moléculas contendo Si e O na sua constituição, mas também para reproduzirem as principais características dos cristais de Silício e de Quartzo. Nós estudamos o centro A através da simulação de uma impureza de O substitucional em um nanocristal de Si, permitindo a otimização de geometria do núcleo do defeito. Nossos resultados indicam a configuração  $O_{int} + Vacância$  como estável, e apontam a existência de dois níveis no *gap*, um nível  $a_1$  ocupado e outro nível  $t_2$  que pode ser ocupado quando da presença de um elétron adicional. Em uma análise para esses dois níveis constatamos que estão fortemente localizados sobre átomos de silício vizinhos ao oxigênio que tiveram o seu ambiente tetraédrico destuído pela presença do defeito.

(FAPESP)

## CÁLCULO DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS DE OXIGÊNIO SUBSTITUCIONAL EM GaAs

Orellana, W. e Ferraz, A.C.  
Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*palavras-chaves: oxigênio, arseneto de gálio, pseudopotencial.*

Experimentalmente é observado que oxigênio quando incorporado substitucionalmente em um sítio de arsênio apresenta um comportamento "U-negativo" possuindo três estados de carga. O modelo proposto para este defeito no estado neutro é similar ao "centro-A" em silício, isto é, o oxigênio se desloca do seu sítio regular da rede na direção [100] (*off-center*). Resultados recentes mostram que este estado neutro é paramagnético [1]. Neste trabalho apresentamos resultados teóricos obtidos com métodos *ab initio*, de oxigênio substituindo arsênio em GaAs no estado de carga neutro. Para a obtenção da geometria atômica e estrutura eletrônica, realizamos cálculos de energia total de primeiros princípios, baseados na teoria do funcional da densidade dentro do esquema de dinâmica molecular proposto por Car e Parrinello. A descrição atômica é feita por meio de pseudopotencial suave, devido a Troullier e Martins, utilizando um conjunto de ondas planas expandido até uma energia cinética de 48Ry e uma supercélula de 32 átomos, onde são relaxados até duas camadas atômicas em volta da impureza. Nossos testes de convergência mostram que a energia de corte utilizada é adequada, observando-se uma dispersão no nível de impureza de 0,1eV. Nossos resultados para o sistema neutro não mostram um deslocamento considerável do átomo de oxigênio em relação ao sítio de arsênio, em concordância com o sugerido por Jones e Öberg [2] e discordando com o modelo experimental *off-center*. Observamos que as distâncias de ligação entre o oxigênio e seus quatro gálions primeiros vizinhos é de 2,17 Å, 11% menores que a ligação Ga-As *bulk*. O nível de impureza foi encontrado no meio do *gap* e corresponde a um nível  $A_1$  ocupado com um elétron o qual fixa o nível de Fermi nesta posição.

- [1] M. Linde, Ch. Ali e J.M. Spaeth, Proc. of ICDF-18, Sendai, Japan (1995).  
[2] R. Jones e S. Öberg, Phys. Rev. Lett. 69, 136 (1992).

(CNPq)

## ESTUDO DO "PINNING" DO NÍVEL DE FERMI NA SUPERFÍCIE DE SEMICONDUTORES COM DOPAGEM PLANAR

*R.Sá de Freitas, J.F.Sampaio, S.L.S. Freire, A.G. de Oliveira, M.V.B. Moreira*

Dept. Física, Universidade Federal de Minas Gerais, CP.702, 30161 970 Belo Horizonte, MG

*Palavras-Chave:* estados de superfície, dopagem planar, pinning do nível de Fermi

Devido a depleção provocada por estados de superfície, espera-se uma variação da concentração de elétrons no poço de potencial de estruturas semicondutoras com dopagem planar, de acordo com a distância dos dopantes à superfície da amostra. Isto sugere que determinando-se a dependência da concentração com a espessura da camada superior do material, pode-se obter informações a respeito do "pinning" do nível de Fermi na superfície.

Utilizando amostras de GaAs com baixa dopagem de Si (dopagem nominal:  $1,1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ) crescida com a técnica de Epitaxia por Feixe molecular, mediu-se a concentração Hall de elétrons no escuro e sob iluminação, à temperatura de 6 K, onde há somente uma subbanda ocupada, para diferentes distâncias  $d$  entre o plano de dopagem e a superfície da amostra. A variação de  $d$  foi conseguida através de sucessivas corrosões. A concentração Hall de escuro decresce monotonicamente com a diminuição de  $d$ , mas, sob iluminação seu valor é aproximadamente constante.

Cálculos autoconsistentes do poço e da energia da subbanda, em que se considera a posição do nível de Fermi na superfície da amostra, foram realizados de modo a ajustar os resultados. Todos os resultados experimentais foram ajustados com um único valor para o nível de Fermi na superfície.

Mostramos assim o importante papel exercido pelos estados de superfície em amostras semicondutoras com dopagem planar de baixa concentração, e demonstramos que a simples técnica de medidas de efeito Hall aliada a cálculos autoconsistentes do poço de potencial podem ser muito úteis para estudos de estados de superfície.

(CNPq, FAPEMIG, FINEP)

## ON THE EFFECTS OF RESIDUAL DOPING IN ASYMMETRIC GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As QUANTUM WELLS

*Fanyao Qu and Paulo César de Moraes*

Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910-900 Brasília - DF

*Palavras-Chave:* poço quântico assimétrico, dopagem

Asymmetric quantum wells have attracted some attention in the last decade particularly because it has been proved to be possible to optically control the 2D electron gas density. Such an optical control of the 2D gas may offer new perspectives for optoelectronic devices. In a single asymmetric quantum well one expects that the band edge profile looks flat under intense illumination, the 2D electron gas being washed out from the quantum well. Under dark condition, however, a non-flat band edge sets in due to the 2D electron gas inside the quantum well. In the present work, the sub-band structure of the 2D electron gas in one-side modulation-doped single asymmetric GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well (SAQW) is calculated, at zero temperature, for residual p-type doping ( $N_a > 0$ ). The calculation is performed in the envelope function approximation and analytical results are obtained. The potential energy, the lowest sub-band binding energy, the areal density, the Fermi level of the two-dimensional electron gas and the depletion lengths are obtained through a relatively simple method of calculation. The material properties and the growth parameters are the input parameters used to obtain numerical values. The approximation discussed here is applied to the limiting case of  $N_a = 0$ . The results obtained for the two limiting cases, doped and undoped structures, are in excellent agreement with experimental data. In addition, our results agree with results obtained from self-consistent calculations for quantum well width running from 100Å up to 300Å, which we think makes the analytical expressions very useful. The effects of the residual doping upon the confinement energy and areal density are presented as well.

(CAPES, FAP-DF, CNPq)

## NITROGEN ANTISITE DEFECT IN ZINCBLENDE-TYPE BORON NITRIDE

*J.L.P.Castineira, J.L.Alves, J.R.Leite, L.M.R.Scolfaro and R.Enderlein*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* BN, defect, metastability

Boron Nitride has attracted a great deal of attention as a new material of extreme hardness, high melting point and useful optical and thermal properties. BN exhibits an hexagonal phase under normal pressure at room temperature. Under high pressure it transforms into the denser zincblende and wurtzite type phases. Despite of the technological importance and of the peculiar behavior of BN when compared to other III-V compounds, there are only few experimental data on the electronic structure of this material. As far as theory is concerned, several studies of the electronic properties of BN have been reported recently. The investigations were restricted, however, to bulk properties only, with no attempts to address the shallow or deep impurity level problems in this compound.

In the present work we report first-principles studies of the structural and electronic properties of the N antisite defect in zincblende type BN. Self-consistent electronic state calculations are carried out using the full-potential linear augmented-plane wave (FLAPW) method within the large unit cell approach. The local density-functional theory is used to take exchange-correlation effects into account. A total energy analysis leads to the conclusion that the center is stable with the N defect atom on the  $T_d$  site and a small inward relaxation of the nearest neighbors. Displacements of the N defect atom in the  $\langle 111 \rangle$  direction and simultaneous relaxations of the nearest N neighbors have been performed in order to search for another stable configuration of the center. It is found that the use of small unit cells and of a few special points in the Brillouin Zone lead to a bistable behavior of the center. However, more realistic calculations with larger unit cells and ten special points clearly indicate that this is an artefact, and that there is no bistability for the N antisite defect in zincblende BN. The defect produces two impurity levels, a fully occupied antibonding  $a_1$  level in the gap, and an unoccupied  $t_2$  level. The behavior of these levels as a function of the antisite N atom displacements is similar to that observed for the anion antisite defects in GaAs and GaP.

## PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM FILMES DE a-Ge:H DOPADOS COM FÓSFORO CRESCIDOS POR CO-SPUTTERING

*Ricardo Campomanes, David Comedi e Ivan Chambouleyron*

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP

13081-970, Campinas, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* dopagem, semicondutores amorfos, germânio

Usando medidas de espectroscopia óptica e de transporte, pesquisa-se neste trabalho, a dopagem substitucional do germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H) com fósforo. As amostras foram preparadas pelo método de *co-sputtering*, onde foram colocados sobre um alvo de germânio pequenos pedaços de fósforo sólido. Grande interesse existe nesse método devido à sua simplicidade e segurança, quando comparado ao uso tradicional de fontes dopantes tais como fosfina ou arsina, gases altamente tóxicos e que demandam altos custos de segurança. Os parâmetros de deposição foram mantidos constantes, sendo somente variada a relação de áreas entre os pedaços de fósforo e do alvo de germânio ( $A = A_p / A_{Ge}$ ) dada no intervalo  $6 \times 10^{-6} \leq A \leq 8 \times 10^{-3}$ . Com o acréscimo de A nas deposições, a condutividade no escuro à temperatura ambiente  $\sigma_{RT}$  apresenta um aumento de até 3.5 ordens de grandeza, com relação ao filme intrínseco. A energia de ativação  $E_a$  decresce de 0.48eV a 0.15eV. Por outro lado, nas medidas de espectroscopia de transmissão óptica na faixa de NIR-VIS, não se observa variações no gap de Tauc, nem em  $E_{04}$  (energia do fóton correspondente a um coeficiente de absorção de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$ ), sendo similares aos valores do filme intrínseco, 1.1eV e 1.21eV, respectivamente. Em adição a isso, o conteúdo de hidrogênio ( $C_H$ ) na série dopada mantém-se aproximadamente constante e de valor similar ao correspondente filme intrínseco (~ 8%). A constância dos valores do gap e de  $C_H$  são indicativos de que as variações observadas no transporte da série de filmes dopados não são originadas por diferenças no conteúdo de hidrogênio ou mudanças no gap. Por conseguinte, as variações de  $\sigma_{RT}$  e  $E_a$  são devidas à incorporação da impurezas de fósforo ligadas na forma tetraédrica na rede de a-Ge:H.

(CNPq)

## ESTUDO TEÓRICO DE DEFEITOS NATIVOS EM BN

Adalberto Fazzio\*, Tomé Mauro Schmidt\*\*, Paulo César Piquini† e Ronaldo Mota†

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

\*\* Departamento de Física, Universidade Federal de Uberlândia, MG

† Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, RS

*Palavras-Chave:* nitrato de boro, defeitos, semicondutores

O Nitrato de Boro cúbico tem uma série de características físicas semelhantes ao Diamante: constante de rede, alta condutividade térmica, alta dureza, gap de energia etc. Porém há uma diferença importante: o C-BN pode ser dopado tipo-*n* ou tipo-*p*, enquanto o diamante somente tipo-*p*. Isso torna o C-BN um material tecnologicamente mais atrativo. A qualidade do C-BN é bastante pobre apresentando uma alta densidade de defeitos tipo vacâncias (N e B), impurezas de oxigênio, antisítios etc.

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e estruturais desses defeitos (antisítio  $B_{\Gamma_1}$ , Vacância $\Gamma_1$  e  $O_{\Gamma_1}$ ). Utilizamos em todos os cálculos um método "ab initio" de Hartree-Fock dentro do modelo de aglomerados moleculares, com 71 átomos. Através de cálculo da energia total calculamos as distorções e relaxações provocadas na rede oriundas do defeito ou impurezas. Na vacância de N os átomos da 1ª vizinhança apresentam uma relaxação simétrica-"outward" da ordem de 20% da distância B-N, com uma pequena energia Jahn-Teller envolvida. O antisítio  $B_{\Gamma_1}$  apresenta um mínimo após uma distorção na direção  $\langle 111 \rangle$  e um estado metaestável na direção  $\langle 100 \rangle$  e o oxigênio diferente do que ocorre em diamante e silício somente relaxa a rede no modo simétrico-A<sub>1</sub>.

## CENTRO-DX: IMPUREZA SIMPLES OU COMPLEXA? AINDA UMA CONTROVÉRSIA!

Karina de Oliveira Barbosa e Adalberto Fazzio

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* defeitos, centro-DX, metaestabilidade

O defeito profundo mais estudado em GaAs é o conhecido centro-DX, centro esse que experimentalmente sabe-se que envolve o átomo de Si como impureza. A importância de entender a sua estrutura microscópica é ainda um grande desafio teórico e de grande importância tecnológica. Recentemente vários trabalhos teóricos foram realizados para compreendê-lo. Dentre eles destacam-se os trabalhos utilizando pseudopotencial "ab initio" no formalismo da densidade local. Esses trabalhos foram realizados no formalismo LDA e a representação da densidade de carga total através de um único ponto da zona de Brillouin (ponto- $\Gamma$ ). Esses cálculos leva-nos a entender o centro-DX como uma simples impureza substitucional:  $Si_{\Gamma_1}$ , que após a captura de um elétron desloca-se na direção  $\langle 111 \rangle$  da ordem 1Å, explicando grande parte das observações experimentais de centro. Esse é o conhecido modelo da grande relaxação (LLR).

Neste trabalho fazemos um estudo bastante sistemático do "aparato" teórico envolvido nos trabalhos anteriores. Primeiramente melhoramos a representação de pontos-K para o cálculo da energia e também vamos além da aproximação LDA, incluindo as correções de gradiente (GGA). Os resultados mostram que o silício após a captura de 1 elétron (Si) tem a posição Td como a mais estável e a posição  $C_{3v}$  é uma posição metaestável. Os cálculos anteriores mostram uma interação efetiva de Coulomb negativa ( $U < 0$ ), os nossos resultados mostram um  $U > 0$ . Esses resultados leva-nos a rediscutir a verdadeira origem microscópica do centro-DX.

## Medidas foto-Hall do efeito de "photo-quench" do centro EL2 em GaAs com dopagem planar de silício.

*Rero Marques Rubinger, Alfredo Gontijo de Oliveira, Maria Ivonete Nogueira da Silva,  
João Antônio Corrêa Filho, Hélio Chacham*  
Departamento de Física da UFMG - MG

*Palavras-Chave:* EL2, MBE,  $\delta$ Si-GaAs

Amostras de GaAs crescidas por meio da técnica de Epitaxia por feixe molecular (MBE) a temperaturas inferiores a 600°C apresentam concentrações significativas de defeitos intrínsecos do tipo EL2. Uma das características mais importantes do centro EL2 é a de que a temperaturas inferiores a 140K e, sob iluminação com luz de energia em torno de 1,18eV a absorção ótica de amostras contendo centros EL2 aumenta expressivamente em um intervalo de tempo de micro-segundos sendo reduzida lentamente em alguns minutos. Ao se desligar a iluminação e ligar novamente nenhum efeito significativo pode ser observado. Este fenômeno é conhecido como "foto-quench" da absorção. Em função da alta resistividade de amostras contendo centros EL2, medições de efeito Hall e de fotocondutividade se tornam difíceis. Ao desenvolvermos as amostras com a dopagem planar próximo à camadas de GaAs supostamente ricas em EL2, a intenção era a de criar um background elétrico a partir do qual pudessemos aferir as propriedades advindas da presença dos centros EL2. Duas amostras foram então desenvolvidas sendo uma crescida com camadas a 300°C e outra a 500°C. As diferenças entre as curvas de concentração Hall, Mobilidade Hall e Fotocondutividade das duas amostras estão de acordo com as concentrações de centros EL2 esperadas para as mesmas. Um modelo físico foi desenvolvido com a intenção de se ajustar os resultados experimentais de acordo com as propriedades óticas e elétricas dos centros EL2. Os ajustes realizados confirmaram a validade do modelo para o efeito de "Photo-Quench".

(CNPq, Fapemig, FINEP).

## INFLUÊNCIA DOS ESTADOS DE SUPERFÍCIE EM AMOSTRAS DE $Al_{0,30}Ga_{0,70}As$ COM DOPAGEM PLANAR DE SILÍCIO

*J.A. Corrêa F., A.G. de Oliveira*  
Departamento de Física -ICEx - Universidade Federal de Minas Gerais.  
Av. Presidente Antônio Carlos, 6627 - Pampulha.. Caixa Postal 702.  
31161-970 - Belo Horizonte - MG - Brasil

*Palavras-chaves:* dopagem planar, estados de superfície, centros DX

Medidas da concentração e condutividade Hall foram realizadas em amostras de  $Al_{0,30}Ga_{0,70}As$  com dopagem planar de silício crescidas à 530°C por epitaxia por feixe molecular (MBE). Duas amostras com concentração Hall de  $3,5 \times 10^{12}$  e  $8,2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  a temperatura ambiente foram estudadas. A distância da dopagem planar em relação à superfície das amostras foi de 0,50 $\mu\text{m}$  e 0,36 $\mu\text{m}$ , respectivamente. As amostras foram montadas em um criostato de circuito fechado de hélio e as medidas foram realizadas no intervalo de 4K à temperatura ambiente no escuro e sob iluminação à 4K usando um LED infra-vermelho de GaAs. As propriedades de transporte elétrico foram estudadas variando a distância da região da dopagem planar em relação à superfície da amostra por sucessivas corrosões químicas. Os resultados mostraram: i) que a concentração Hall no escuro é pouco sensível à proximidade da região da dopagem planar à superfície da amostra; ii) mas é fortemente alterada durante o transiente para o regime de saturação sob iluminação (estado estacionário). O resultado i sugere que a posição do nível de Fermi na superfície da amostra é independente da distância da região da dopagem planar à superfície da amostra em condições de equilíbrio termodinâmico. O resultado ii é explicado através de um modelo de 2 canais de condução espacialmente separados, a saber: um por elétrons localizados na região da dopagem planar e outro por buracos localizados abaixo da superfície da amostra. Finalmente, o fato de que o fenômeno de fotocondutividade persistente positiva ser apenas observado em baixas temperaturas (<50K) é relacionado com os tempos de relaxação do defeito metaestável DX e de recombinação das cargas espacialmente separadas.

(CAPES, CNPq, FAPEMIG)

## CARACTERIZAÇÃO FOTOACÚSTICA DE GaAs-n

*Angelo Luis Gobbi*

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento da TELEBRÁS - Campinas - SP  
*Leonilson Ribeiro Nunes, Gladiston Xavier Diniz Silva, Antonio Pinto Neto*  
Universidade Federal do Maranhão - DEFIS

*Palavras-Chave:* fotoacústica, semicondutor, caracterização

O princípio básico da Espectroscopia Fotoacústica consiste na detecção do calor produzido na amostra devido a processos de deexcitação não-radiativo, resultante da absorção de qualquer tipo de radiação modulada incidente. Nossas medidas foram feitas em um sistema constituído por um Espectrômetro Fotoacústico totalmente automatizado, desenvolvido na UFMA. O sinal fotoacústico ( intensidade e fase ) produzido na célula é detectado por um sensível microfone do tipo de membrana a condensador. A célula é de dois feixes e foi utilizada na configuração de incidência frontal. Nossa fonte de luz é uma lâmpada de xenônio de 1000 W. Utilizamos como amostras substrato de arseneto de gálio tipo-n dopado com silício (  $n = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ). A superfície das amostras foram modificadas com corrosão por íons radiativos ( tendo como gás o hidrogênio ), com diferentes potências, o que deixou as superfícies com diferentes quantidades de arsênio, rica em gálio e com uma maior área efetiva. Medindo-se o sinal fotoacústico em função da frequência de modulação da luz, determinou-se o modelo de geração do sinal e os termos de fonte que devem ser utilizados ( difusão, recombinação no volume e recombinação nas superfícies ) nas equação de difusão do calor e na equação de difusão dos portadores fotoinjetados. Separando-se os diferentes mecanismos de recombinação, ajustamos a equação da fase, quando apenas os mecanismos de recombinação no volume e na superfície são termos dominantes, determinando a difusividade térmica, o tempo de recombinação não radiativo, o coeficiente de difusão dos portadores, bem como a modificação na velocidade de recombinação na superfície das várias amostras, modificadas pelos diferentes valores de potência usados . Utilizou-se o algoritmo de Levenberg-Marquardt para ajustar os parâmetros.

(FAPEMA, CNPq)

## POLARIZABILIDADE DE UMA IMPUREZA DOADORA EM UM FIO QUÂNTICO SEMICONDUTOR DE GaAs

*Francisco Ap. Pinto Osório, Álvaro A. Caparica, Antônio Newton Borges*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás

*José Roberto Leite*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* fio quântico, impureza doadora, semicondutores

Neste trabalho estudamos o comportamento da polarizabilidade elétrica de uma impureza doadora modelada como hidrogenóide, localizada dentro de um fio quântico quase-unidimensional de GaAs envolvido por  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  de forma retangular, com altura das barreiras finitas. Calculamos a polarizabilidade elétrica  $\alpha$  como função das dimensões do fio para vários valores das alturas das barreiras de potenciais e diferentes posições da impureza dentro do fio. Consideramos que o campo elétrico  $\mathcal{E}$  está sendo aplicado na direção paralela à seção reta do fio quântico (plano xy) formando um ângulo  $\theta$  com o eixo x. Utilizamos em nossos cálculos o método variacional. Escolhemos uma função de onda tentativa para o elétron,  $\psi_0$ , com três parâmetros variacionais, no caso de campo elétrico nulo e, para campo não nulo, adotamos o modelo de Hasse para a função de onda, onde  $\psi = \psi_0(1 + \lambda \mathcal{E} \cdot r)$ , onde  $\lambda$  é um parâmetro variacional. Trabalhos anteriores sobre este tema em fios quânticos trataram o fio no modelo de barreiras de potencial de altura infinita. A principal diferença que observamos entre os modelos com alturas das barreiras de potencial infinita e o modelo mais realista de barreiras de potencial finita, é que quando uma ou mais dimensões do fio são reduzidas, ao contrário do caso com barreiras infinitas, a polarizabilidade diminui inicialmente até um certo ponto, porém, depois cresce tendendo ao valor para o átomo de hidrogênio no bulk do AlGaAs. Os resultados da polarizabilidade elétrica de doadores em fios quânticos com altura finita da barreira de confinamento são novos na literatura.

## ESTRUTURA ELETRÔNICA DA INTERFACE METAL-SiC

*Maria Matos<sup>(1)</sup> e Roald Hoffmann<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup>Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

<sup>(2)</sup>Chemistry Department, Cornell University, Ithaca, NY, 14850, USA

**Palavras-Chave:** carbeto de silício, estrutura eletrônica, interfaces

O carbeto de silício (SiC) é um material semiconductor com o gap de energia variando entre 2,3 eV e 3,3 eV, dependendo da estrutura cristalina encontrada fcc, ou hexagonal, ou ainda uma mistura de ambas (poliitipismo). Uma excepcional estabilidade térmica e química torna esse material um candidato à fabricação de dispositivos que funcionem a altas temperaturas. No entanto verifica-se que os contatos metálicos não apresentam o mesmo grau de estabilidade. A formação de camadas metálicas vem por vezes acompanhada de reações na superfície de SiC originando camadas intermediárias de compostos com silício ou carbono. Estamos estudando a adsorção de metais em superfícies de SiC, com o objetivo de compreender os mecanismos básicos da interação entre o metal e o semiconductor. A estrutura eletrônica da interface é obtida utilizando-se o método de cálculo tight-binding extended-Hückel. A superfície cristalina é descrita por faixas (slabs), conjunto finito de planos (infinitos) cristalinos. O estudo da interface será feito por etapas sucessivas, começando com o material cristalino puro, descrito pela sua estrutura cristalina 3D, ainda na aproximação tight-binding extended Hückel. Nessa fase, diversas estruturas, cúbica, hexagonal e poliitípicas (4H, 6H) serão analisadas a fim de determinar como varia a estrutura de bandas e densidade de estados, principalmente na região do gap. Os primeiros resultados extended Hückel obtidos para o grupo isolado (molécula) SiC mostram uma inversão de níveis  $\sigma$  e  $\pi$ , causando o aparecimento de um "gap", embora ainda pequeno comparado com os valores experimentais conhecidos para o material.

Em seguida serão estudadas, na aproximação de faixas (2D), superfícies livres de C e Si com o fim de determinar o número de planos cristalinos necessário para reproduzir a estrutura de bandas 3D. A interação com o metal será estudada considerando-se camadas adsorvidas em superfícies de C e Si, variando-se o sítio de adsorção para determinar a energética de cada um deles. A reconstrução nas superfícies será estudada numa etapa posterior do trabalho.

## ANTIDOTS ARRAYS IN MAGNETIC FIELDS: CONDITIONS FOR EXPERIMENTAL OBSERVATIONS OF HOFSTADTER-LIKE SPECTRA

*M. A. Andrade Neto and P. A. Schulz*

Instituto de Física, C.P.G. 165, UNICAMP 13083-970 Campinas SP Brazil

**Keywords:** lateral superlattices, commensurability effects, Hofstadter spectra

The dynamics of band electron in magnetic fields is an interesting problem and has been investigated by many authors over the past three decades. Commensurability effects lead to complex self-similar properties of the electronic structure of periodic systems. Nevertheless, for typical crystal lattice parameters, these effects would be observable only for prohibitively high magnetic fields. In the past few years, the fabrication of periodic antidots arrays lead to a growing interest in the magnetotransport properties in the classical and semiclassical regimes of these artificial bidimensional crystals with submicron lattice parameter[1]. A further reduction of the lattice parameter of these antidots arrays envisages the possibility of observing commensurability effects on their electronic structures in the presence of a perpendicular magnetic field, namely a Hofstadter-like spectrum, and the related effects on the magnetotransport in the quantum regime. Recently we showed the behaviour of Hofstadter-like spectra in infinite antidots arrays, with arbitrary potential modulation strength[2]. Concerning the conditions to observe such effects in real systems, two questions are raised: (i) the lower limit for the size of a finite array in order to define a Hofstadter spectrum signature, as well as the interplay of these spectrum with edge states; and (ii) the stability of this spectrum in the presence of disorder. In the present work we address both questions in the framework of a tight-binding model. We clearly see Hofstadter-like signatures in the modulation of the lower band of a finite system as small as a 7X7 antidots array. The coupling of bulk and edge states is tuned by the magnetic field. The current field for a strong coupling situation illustrate the physical origin of destructive interference in the transmission probability - Fano resonances - reported in the literature[3].

[1] D. Weiss *et al.* Phys. Rev. Lett. 70, 4118 (1993) and references therein.

[2] M. A. Andrade Neto and P. A. Schulz, Phys. Rev. B 52, 14093 (1995).

[3] I. V. Zozulenko, F. A. Maa, and E. H. Hauge, Phys. Rev. B 51, 7058 (1995).

## ESTADOS ELETRÔNICOS E ESTRUTURA ATÔMICA DA INTERFACE ZNSE/ZNTE (001)

*A. Janotti, A. C. Ferraz  
Instituto de Física - USP*

*Palavras chaves:* interface, estrutura eletrônica, estrutura atômica

Heteroestruturas baseadas em semicondutores II-VI têm despertado especial interesse, recentemente, devido ao grande potencial de aplicações em dispositivos optoeletrônicos que operam na região da luz visível. Com o advento de novas técnicas de crescimento, MBE (Molecular Beam Epitaxy) e MOCVD (Metalorganic Vapor Deposition), tem sido possível o crescimento de heteroestruturas com precisão de até uma monocamada atômica. Sendo que as propriedades eletrônicas e estruturais da interface dessas heteroestruturas são importantes na fabricação de dispositivos, um estudo detalhado dessas propriedades se faz necessário. Neste trabalho realizamos um estudo teórico das propriedades eletrônicas e estruturais da interface ZnSe/ZnTe (001). Para tanto utilizamos a teoria do Funcional Densidade na aproximação de densidade local dentro do esquema de dinâmica molecular proposto por Car e Parrinello. São utilizados pseudopotenciais gerados pelo método de Troullier e Martins, tomando o orbital  $3d$  do Zn como parte do caroço e utilizando a correção a caroço não linear para o termo de troca e correlação. Numa primeira etapa estudamos a interface abrupta, e em seguida consideramos a troca de átomos de Se e Te na região da interface, de tal maneira que se permitisse formar compostos intermediários nesta região. Determinamos, ainda, a estabilidade dessas interfaces com relação a segregação de fase. Nos dois casos calculamos o "valence band-offset", e comparamos esses valores com resultados experimentais.

(CNPq)

## KINETICS OF THERMAL $\text{SiO}_2$ THIN FILM FORMATION: THEORETICAL APPROACH BASED ON NUMERICAL SIMULATIONS

*Borko D. Stojić and Eronides F. da Silva Jr.*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco

*Keywords:* silicon, oxidation, film

Understanding of the silicon oxidation process, especially in the early stage relevant for thin film  $\text{SiO}_2$  formation, represents one of the basic prerogatives for the rapid technological development of microelectronic devices. Although existing phenomenological and more basic theories rather successfully describe the growth of silicon dioxide films for most of the existing published experimental data, they are all based on defining a large number of independent variable parameters. The aim of this work is to attempt to establish the basic ingredients relevant for the experimentally observed thermal  $\text{SiO}_2$  growth kinetics, focusing on thin film formation. We first perform computer simulations, based on a simple Metropolis type algorithm for simulating the oxygen diffusion. We find that at the very beginning of simulation an oxidation front of several lattice constants is rapidly formed. Thereafter, the front retains its depth, and moves at a decreasing rate towards the interior. The oxidation rate in early stages of simulation is thus governed by two processes: the rapid formation of the front itself, and its diffusion. The self-affine microscopic structure of the oxidation front observed in the simulations suggests that theoretical description should take into account the fractal nature of the  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  interface. Further assuming that the diffusing species perform Brownian walks within the material, we obtain an expression for the oxide thickness temporal behavior. Fitting this expression to a power law yields different exponent values on different time scales, in accordance with simulations, the experiments, and with the other existing theoretical approaches. The numerical simulations also provide means to study the fractal structure of the oxidation front on the microscopic scale, with possible relevance for future experimental work.

(CNPq)

## NÍVEIS DE ENERGIA DE UM POLARON EM FILMES SEMICONDUTORES COM DOPAGEM DELTA INTERFACIAL

*A. M. Alencar, V. N. Freire e G. A. Farias*

Departamento de Física - UFC

*Palavras-Chave:* polarons em filmes, acoplamento elétron fônon, dopagem delta

A compreensão dos efeitos de superfície em filmes semicondutores é de bastante relevância para o desenvolvimento de novas tecnologias. A interação elétron-fônon em sistemas semicondutores, e em particular, os estados polarônicos tem se tornado um tema bastante importante devido principalmente a crescente miniaturização dos dispositivos semicondutores. A proposta deste trabalho é investigar os efeitos causados sobre um elétron confinado num filme dielétrico pela presença de uma densidade superficial de carga nas interfaces planas. As equações de Maxwell são resolvidas com as devidas condições de contorno para obtenção da relação de dispersão de plasmons superficiais. Estes resultados são utilizados para obter o Hamiltoniano do sistema em segunda quantização que descreve o acoplamento elétron-fônon no filme semicondutor com dopagem delta nas superfícies. A teoria de perturbação é usada para calcular as correções nos níveis de energia do polaron. Foram obtidos resultados numéricos para InSb, GaAs e ZnSe, com espessuras que variam de 10 a 100 unidades da rede cristalina. É mostrado que as frequências dos modos superficiais aumentam com a densidade superficial de carga, e que o ramo positivo da relação de dispersão é mais sensível a dopagem superficial de carga que o ramo negativo. Obtivemos também resultados para a função de acoplamento do elétron com os fônon superficiais óticos, onde observamos a diminuição do efeito da dopagem delta com o aumento da largura do filme. Obtida a função de acoplamento elétron-fônon, calculamos a correção nos níveis de energia para o polaron. Mostramos que a presença da dopagem delta nas interfaces não altera os modos de volume, e sim os modos de superfície.

## ORBITS OF TWO INTERACTING PARTICLES IN A MAGNETIC FIELD

*Sergio Curilef<sup>1</sup> and Francisco Claro<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ( CBPF )  
Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180, Rio de Janeiro, Brazil

<sup>2</sup>Facultad de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile  
Casilla 306, Santiago 22, Chile.

*Palavras-Chave:* Classical dynamics, Two-body problem, Two dimensions.

Since the discovery of the Quantum Hall Effect there has been much interest in understanding the dynamics of electrons confined to move in two dimensions in the presence of a magnetic field perpendicular to the plane of motion. The confinement is possible at the interface between two materials, typically a semiconductor and an insulator such as GaAs and AlGaAs, where a quantum well that traps the particles is formed, forbidding their motion in the direction perpendicular to the plane of the interface at low energies.

We present a complete set of solutions for the classical two-body problem in a plane and a perpendicular magnetic field ignoring radiation and relativistic effects. Our purpose is to provide information on the trajectories in order to guide further efforts in the understanding of the quantum effects. Also, there have been recent experiments involving the classical dynamics of two dimensional electrons in a magnetic field, such as the Weiss oscillations. We study the case of two identical particles. The problem is separable in center of mass and relative coordinates. The Coulomb repulsion affects the relative motion. We find that the simplest trajectories are similar to those of a single particle in the presence of crossed electric and magnetic fields (Hall configuration). In addition to this, we discuss the case of two particles of the same mass and opposite charge. The problem is non-separable, yet becomes one dimensional in a special case. This motion occurs over ribbon that may be straight.

( CLAF/CNPq; FONDECYT )

## FABRICAÇÃO DE LASERS DE ALTA POTÊNCIA DO TIPO RIDGE USANDO REACTIVE ION ETCHING

A.L. Gobbi, A.M. Machado, A.C. Sachs, A. Paradisi e R.B. Martins  
CPqD-TELEBRÁS, Campinas, S.P.

*Palavras-chave:* Laser, alta potência, reactive ion etching.

Lasers de poços quânticos tensionados de GaInAs/GaAs/GaInP operando em  $0.98\mu\text{m}$ , são de grande interesse para o bombeamento de amplificadores ópticos à fibra dopada com Érbio. O uso do GaInP como camada confinante melhora significativamente a confiabilidade do dispositivo, quando comparado ao GaAlAs, uma vez que a presença do Alumínio pode causar degradação no dispositivo. As camadas epitaxiais que constituem a estrutura destes dispositivos foram crescidas por MOCVD à pressão atmosférica sobre substratos de GaAs. Como a profundidade dos canais (altura do ridge) determina o confinamento óptico lateral, é de suma importância ter um controle efetivo sobre a formação desta estrutura para que se obtenha a máxima performance. Neste trabalho apresentamos o processo de formação de uma estrutura tipo RIDGE utilizando uma combinação de dois processos de reactive ion etching que fazem uso da seletividade entre o GaAs e o GaInP. Primeiro, o GaAs é atacado usando  $20\text{scm}$  de  $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ,  $50\text{mtorr}$ ,  $100\text{W}$ . Nestas condições a velocidade de ataque é de  $\sim 1500\text{Å}/\text{min}$  e a camada de GaInP não é atacada. Em seguida, a camada de GaInP é removida com uma mistura de  $\text{CH}_4$  e  $\text{H}_2$  (1:4) a  $40\text{mtorr}$ ,  $400\text{W}$ . Sob estas condições a velocidade de ataque é de  $\sim 350\text{Å}/\text{min}$ . Quando a corrosão alcança a camada "stop etch" de GaAs a velocidade de ataque cai a zero, dando início à deposição de um filme de polímero, o qual pode ser removido com plasma de  $\text{O}_2$ . Este procedimento nos permitiu obter um excelente controle sobre o perfil e a profundidade do RIDGE. O confinamento lateral da corrente foi obtido através da deposição de  $\text{SiO}_2$ . TiPtAu e AuGeNi foram usados como contatos  $p$  e  $n$  respectivamente. Lasers com estrutura tipo RIDGE fabricados por este processo de corrosão à seco apresentaram excelentes características eletro-ópticas. Dispositivos com  $300\mu\text{m}$  de comprimento de cavidade apresentaram corrente limiar de  $6\text{mA}$ . Dispositivos com  $1200\mu\text{m}$  de cavidade mostraram corrente limiar de  $\sim 20\text{mA}$  e potência de saída de até  $250\text{mW}$  em modo pulsado. A eficiência externa medida foi de  $407\text{mW}/\text{A}$  e a perda interna foi de  $3\text{cm}^{-1}$ . A baixa perda interna indica que o processo de corrosão não criou rugosidades nas paredes laterais da estrutura. Concluindo, nós obtivemos lasers do tipo RIDGE com baixa corrente limiar e alta potência, otimizando o processo de fabricação.

## DENSIDADE ELETRÔNICA DA SUPERFÍCIE Si(111) $7 \times 7$ CALCULADA POR MÁXIMA ENTROPIA A PARTIR DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X E ELÉTRONS

C. A. M. Carvalho<sup>1</sup>, H. Hashizume<sup>2</sup>, I. K. Robinson<sup>3</sup>

- 1) Inst. Física, USP — endereço atual: Depto. de Física, Univ. Federal do Paraná, Curitiba
- 2) Research Laboratory of Engineering Materials, Tokyo Institute of Technology, Japão
- 3) Dept. of Phys., Univ. of Illinois, USA

*Palavras-chave:* superfície, máxima entropia, difração

O nível de caracterização de materiais exigido pela tecnologia atual atingiu um ponto onde o conhecimento detalhado da estrutura atômica de superfícies é importante. A superfície tem um ambiente diferente do interior do material, o que provoca reconstrução e relaxação das estruturas atômicas nas camadas próximas da superfície. Densidades eletrônicas precisas são necessárias para um melhor entendimento da origem e natureza da reconstrução, assim como das ligações químicas e propriedades eletrônicas da superfície.

O método da máxima entropia (ME) é uma técnica que permite inferir a densidade eletrônica usando apenas a informação disponível. O resultado é totalmente não-tendencioso, pois nenhuma hipótese é feita no cálculo. Em particular, o método não supõe que as amplitudes de reflexões não medidas sejam zero.

Mapas de densidade eletrônica foram calculados para uma estrutura de superfície pelo método da máxima entropia, usando dados de difração de raios-X e elétrons. Os mapas mostram claramente todos os 102 átomos do modelo dimer-adatom-stacking fault de Takayanagi. As posições atômicas determinadas a partir do mapa concordam bem com os resultados de um refinamento por mínimos quadrados. A qualidade dos mapas é muito superior à proporcionada por síntese de Fourier. Existem indicações de ligações eletrônicas entre átomos. A confiabilidade do método ME é discutida e dúvidas levantadas na literatura são dirimidas. Mostra-se que o procedimento de cálculo deve ser continuado até valores de  $\chi^2 < 1$  na maioria dos casos, e que a incerteza nos resultados está diretamente ligada à incerteza nos dados. Apresenta-se um método para estimar a incerteza nos valores da densidade eletrônica e para identificar as características confiáveis dos mapas. Mostra-se também que as características confiáveis e incorretas são causadas por imprecisão dos dados, e não constituem uma deficiência do método.

## O COEFICIENTE PELTIER NA INTERFACE SÓLIDO/LÍQUIDO DE UMA LIGA

*Lucas Máximo Alves (\*)*, *Bernhard Joachim Mokross (\*\*)*

(\*) Departamento de Engenharia de Materiais, Setor de Ciências Agrárias e de Tecnologias, Universidade Estadual de Ponta Grossa - DEMA-UEPG, (\*\*) Departamento de Física e Ciências dos Materiais, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** coeficiente Peltier, interface sólido/líquido, entropia de fusão

O coeficiente Peltier é definido na interface de junção de semicondutores, porém Ioffe (1952) chamou a atenção para a existência deste coeficiente na interface sólido/líquido (S/L) dos materiais, sugerindo a utilização do efeito Peltier na obtenção de materiais homogêneos crescidos com campo elétrico aplicado. Bardeen (1958) relacionou o coeficiente Peltier com o calor latente dos materiais. Usamos cálculos de termodinâmica irreversível e encontramos que este coeficiente está relacionado com a variação de entropia de fusão entre as fases S/L e com a diferença do potencial químico entre elas. Usando-se estes resultados, o cálculo do coeficiente Peltier para substâncias puras não se confirma na prática, por causa da carga transportada entre as fases S/L na solidificação com campo elétrico, que não é exatamente a carga de valência. Modelos de fase líquida são necessários para se quantificar a carga total transportada entre as fases, e neste caso, a diferença entre os potenciais químicos das fases é nulo. Porém no caso de ligas binárias o problema da carga transportada pode ser contornado usando-se diretamente a variação de entropia por unidade de carga dos íons mais a diferença entre os potenciais eletroquímicos, para os diferentes casos de solidificação onde aparece uma camada de contorno após a interface. Usando-se os resultados de Tiller (1953) para o perfil da camada de contorno, calculou-se o coeficiente Peltier entre as fases S/L de uma liga binária qualquer, e encontrou-se termos explícitos de variação de entropia e termos de troca iônica. Estes resultados são de grande utilidade no controle de uma solidificação homogênea com campo elétrico, de materiais que apresentam alta taxa de segregação e baixos coeficientes de difusão.

(CAPES-CNPq)

## EFEITOS INTERFACIAIS EM POÇOS DUPLOS GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As NÃO-ABRUPTOS COM DOPAGEM

*A. K. Freire, G. A. Farias, e V. N. Freire*

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030  
Campus do Pici, 60455-760 Fortaleza, Ceará

**Palavras-Chave:** poços duplos, interfaces GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, dopagem

Diodos RIT baseados em poços quânticos duplos - barreiras triplas possuem melhor performance que aqueles baseados em poços simples - barreiras duplas. Quando dopados, múltiplos poços quânticos são também importantes por serem a base de dispositivos semicondutores que operam com correntes elevadas. Devido a dopagem, regiões interfaciais de duas a três células unitárias nos contornos da densidade de carga foram observadas em multi-camadas GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As altamente dopadas com Be ( $\geq 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>) [1]. Recentemente, Freire *et al* [2] mostraram que efeitos interfaciais e da camada de acumulação em heterojunções GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dopadas não-abruptas são importantes no caso de dopagem elevada e interfaces largas. Neste trabalho estuda-se as modificações nos níveis de energia de poços duplos GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dopados produzidas pela existência de interfaces graduais. Mostra-se que o desdobramento característico dos níveis de energia é reduzido e deslocado para regiões de energias mais elevadas em consequência das interfaces. As reduções e deslocamentos aumentam com os níveis de dopagem no poço duplo. As funções de onda simétrica e anti-simétrica são calculadas para cada nível desdobrado de energia, e apresentam tanto uma redução acentuada da amplitude das mesmas dentro dos poços, como uma menor penetração nas barreiras com o aumento das larguras interfaciais.

[1] H. W. M. Salemink, O. Albrektsen, and P. Koenrad, *Phys. Rev. B* 45, 6946 (1992).

[2] A. K. Freire, J. Ribeiro Filho, G. A. Farias, and V. N. Freire, *Superlatt. Microstruct.* 17, 35! (1995).

## Descontinuidade das faixas de valência das interfaces AlAs:Si:GaAs e AlAs:Ge:GaAs

R. H. Miwa e A. C. Ferraz  
Instituto de Física - USP

Palavras chave: "valence band offset", interfaces, heteroestruturas.

O estudo dos efeitos tanto estruturais quanto eletrônicos, das interfaces AlAs:GaAs, com a inclusão dos elementos da coluna IV, basicamente Si ou Ge, são de considerável interesse tecnológico, uma vez que é possível o controle do "valence band offset" (VBO) nesses materiais.

Existem alguns cálculos teóricos onde é previsto um comportamento linear do VBO com a concentração de Si ou de Ge na interface, e esse tipo de comportamento concorda bem com os resultados experimentais até uma interface com meia monocamada de elementos da coluna IV, porém para uma interface com uma monocamada esse comportamento linear já não é, experimentalmente, verificado, divergindo portanto dos resultados teóricos constantes na literatura.

Realizamos neste trabalho um estudo teórico do VBO para as interfaces AlAs:GaAs com a inclusão de uma monocamada de Si ou de Ge, para diferentes configurações atômicas na interface. Esses elementos do tipo IV se encontram espalhados por uma região equivalente à duas monocamadas vizinhas à interface. Os cálculos foram realizados dentro do esquema de dinâmica molecular de Car e Parrinello, utilizando-se da teoria do funcional densidade com pseudopotenciais de primeiros princípios e aproximação de densidade local. Também determinamos a estabilidade das interfaces para as diferentes configurações estruturais.

Nossos resultados para o VBO concordam bem com os valores experimentais para uma monocamada de Si ou de Ge na interface, bem como a sua dependência com a ordem de crescimento. Verificamos assim uma redução (aumento) do VBO para estruturas onde o AlAs (GaAs) é crescido sobre GaAs (AlAs) com a presença do Si ou Ge na interface. Esta dependência é devido ao sentido de interdifusão desses elementos, aumentando ou reduzindo o dipolo na interface.

## Estudo teórico da ação surfactante do Te no crescimento de InAs:GaAs

R. H. Miwa, A. C. Ferraz  
Instituto de Física-USP;  
W. N. Rodrigues, H. Chacham  
Instituto de Ciências Exatas-UFMG.

Palavras-chaves: surfactante, superfície, telúrio.

Apresentamos neste trabalho um estudo teórico da ação surfactante do Te no crescimento epitaxial do InAs sobre o GaAs. Os cálculos foram realizados utilizando-se da teoria do funcional densidade com pseudopotenciais "ab-initio" e aproximação de densidade local, no esquema de dinâmica molecular de Car e Parrinello.

Resultados experimentais indicam que a inclusão de uma monocamada de Te sobre a superfície do GaAs, antes da deposição do InAs, permite o crescimento de até 6 monocamadas pseudomórficas de InAs, sem a ocorrência de uma transição 2D para 3D, quanto à forma de crescimento. Porém, recentes resultados experimentais indicam que parte do Te depositado fica "preso" na interface InAs:GaAs, numa concentração que ultrapassa o limite de solubilidade deste elemento em materiais III-V.

Nossos resultados indicam que a dimerização do Te na superfície de GaAs (001) é muito pequena. Quando uma monocamada de As adicional é depositada sobre o Te. A ação surfactante do Te foi estudada em duas situações: a) Quando o In é depositado sobre o Te, verificamos que a passagem de todo o Te para a superfície, através de uma sequência de troca de dímeros de In e dímeros de Te, reduzindo a energia livre da superfície. Portanto uma monocamada de Te flutua sobre uma camada de In. b) Quando o As é depositado sobre o Te, novamente através de uma sequência de troca de dímeros, verificamos que a menor energia livre é aquela obtida quando metade dos átomos de Te interdifundem para a superfície, meia monocamada. Portanto o Te flutua apenas parcialmente sobre a camada de As. Este último resultado é consistente com a observação experimental de que apenas uma fração de cobertura de Te excedendo a 0,5 monocamadas flutua sobre o InAs crescido sobre o GaAs<sup>1</sup>.

[1]-W.N. Rodrigues, V.H. Etgens, M. Sauvage-Simkil, G. Rossi, F. Sirotti, R. Pinchaux e F. Rochet, *Sol. State Comm.* 95, 873 (1995).

## EVOLUÇÃO TEMPORAL DE DEFEITOS NA INTERFACE SiO<sub>2</sub>/Si APOS ALTAS DOSES DE RADIAÇÃO IONIZANTE

E. A. de Vasconcelos e E. F. da Silva, Jr.

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
Cidade Universitária, Recife PE, 50670-910, Brasil.

*Palavras-Chave:* defeitos, interface, dispositivos mos

A geração de defeitos nas vizinhanças da interface SiO<sub>2</sub>/Si em dispositivos microeletrônicos fabricados com tecnologia Metal/Óxido/Semicondutor (MOS) tem sido objeto de intensa pesquisa nos 35 anos, e suas propriedades são de importância fundamental no desenvolvimento de novas tecnologias e dispositivos MOS avançados. Neste trabalho, capacitores MOS foram fabricados e irradiados com doses de raios-x na faixa de 0-500 Mrad (Si) e caracterizados antes e após a irradiação através de medidas da capacitância-voltagem nos regimes quasi-estático e de altas frequências.

A análise da geração de defeitos na interface SiO<sub>2</sub>/Si indica um comportamento com a dose de radiação que segue uma lei de potência na forma  $D_{it} \sim (dose)^\alpha$ , onde  $D_{it}$  é a densidade de armadilhas de interface e  $\alpha$  em geral se comporta com  $1/2 \leq \alpha \leq 1$ , para uma larga variedade de amostras com seus parâmetros de processo sendo controlados. Mais ainda, para cada dose a densidade de defeitos evolui no tempo, mesmo após cessada a irradiação, por períodos de até milhares de horas.

Durante estes estudos observou-se o aparecimento do efeito de redução aparente de dopantes em capacitores irradiados com doses superiores a 20 Mrad (Si) apresentando similar dependência temporal. Nestes casos, há uma correlação direta entre o comportamento da redução de dopantes e as densidades de carga e armadilhas de interface geradas nestes dispositivos. Estas observações certamente são de fundamental importância para um melhor entendimento da dinâmica de defeitos interfaciais gerados por radiação ionizante e o desenvolvimento de novas tecnologias em estruturas de dispositivos MOS.

(CNPq, FINEP)

## THEORY OF ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF SCHOTTKY BARRIERS.

*Hari Mohan Gupta*

Departamento de Física - Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP

*Keywords:* MIS structures, Schottky barriers, interface

Recently Gupta and Morais (1,2) showed the variation of potential and electrical field inside the depletion region of a Schottky barrier when impurities are distributed as in amorphous materials. In the present work, we discuss a generalized theory of current vs. applied potential of amorphous semiconductor, or insulator Schottky barrier also considering surface states in addition to doped impurities at a single energy level and energetically distributed bulk impurities. We consider a thin oxide layer of about 10 Å thickness in between metal and semiconductor. Variation of the Fermi level close to contact and the decrease in barrier height due to potential fall on oxide layer is also considered. In general we observe: (i) decrease in barrier height due to potential fall on oxide is important only for contact field above 10<sup>5</sup> V/cm. (ii) Log J is proportional to  $V_{ap}^{1/4}$  for crystalline material while to  $V_{ap}^{1/2}$  for amorphous material Schottky barrier. (iii) Surface states decreases contact field. However they are significant only if their density is more than 10<sup>12</sup> cm<sup>-2</sup> eV<sup>-1</sup>. Bulk states increases contact field. (iv) Current density increases with increase of oxide thickness. The present theory can also be applied to crystalline material structures or contacts without oxide layer.

(1) H.M.Gupta and M.B. Morais, J.Appl.Phys. 68, 176 (1990).

(2) H.M.Gupta, J.Phys.Condens. Matter 4, 3507 (1992).

## PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DE MULTICAMADAS a-Si/a-Ge: ORDENAMENTO QUÍMICO

*Jonatan João da Silva, Fernando Brito Mota, Gilberto Paiva e Adalberto Fazzio*  
Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* multicamadas, interfaces, semicondutores

O estudo de multicamadas de sistemas amorfos tipo a-Si:H/a-Ge:H tem sido muito estudado recentemente devido ao grande interesse tecnológico na fabricação de dispositivos eletrônicos, células solares, dispositivos ópticos etc. Embora um grande número de trabalhos venha sendo realizado no estudo desses sistemas, particularmente experimentais referentes às condições de crescimento por PECVD, poucos são os trabalhos teóricos dedicados a entender as propriedades estruturais na região da interface.

Neste trabalho estudamos as multicamadas de a-Si/a-Ge com condições periódicas de 1024 átomos por célula unitária. Utilizamos o método de simulação de Monte Carlo no ensemble NPT através de um modelo de potencial clássico. Nosso objetivo foi entender o ordenamento químico na região da interface e processos de autodifusão para diferentes temperaturas.

As estruturas resultantes são caracterizadas pelas funções de distribuição radial (RDF) e angular. Como estamos interessados em fenômenos que são importantes na determinação de propriedades eletrônicas, o estudo do ordenamento químico (curto-alcance) é fundamental. Através de um parâmetro de desordem obtemos importantes informações do sistema.

## PROPRIEDADES TERMOMECAÑICAS DE GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO

*Maurício Moraes de Lima Jr. e Francisco das Chagas Marques*  
Universidade Estadual de Campinas - Unicamp - Instituto de Física "Gleb Wataghin"

*Palavras Chave:* germânio, módulo de Young, stress

Os semicondutores amorfos vem ocupando cada vez mais um papel de destaque entre os materiais que possuem aplicações em dispositivos eletrônicos. Isto se deve principalmente ao fato de serem mais baratos, fáceis de preparar, e de serem depositados em quase qualquer substrato. O germânio amorfo é um material de interesse uma vez que, devido ao valor de sua banda proibida, pode ser utilizado em células solares *tandem* ou mesmo em ligas com outros elementos a fim de se produzir compostos com diferentes banda proibida. Neste trabalho investigamos algumas propriedades termomecânicas (*stress*, coeficiente de dilatação térmica e módulo de Young) de filmes de germânio amorfo hidrogenado, em função do conteúdo de hidrogênio (variando aproximadamente entre 0 e 20%). Os filmes foram depositados em substratos cristalinos de germânio e silício com orientação (111) pela técnica de *rf sputtering*. Para a obtenção dos parâmetros acima é necessário a determinação do raio de curvatura do sistema filme/substrato. Para isto usamos um sistema baseado na deflexão de um feixe de laser de HeNe que incide perpendicularmente à amostra, que se encontra em um forno através do qual podemos controlar a temperatura. Com os resultados obtidos determinamos a variação das propriedades elásticas e do *stress* em função da concentração de hidrogênio nos filmes. Encontramos em nossas amostras valores de *stress* compressivos que apresentavam, em módulo, um máximo na região intermediária de concentração de hidrogênio. Este comportamento está relacionado com a estrutura dos filmes. *Stress* do tipo compressivo são geralmente associados a filmes com boas propriedades estruturais. O relaxamento do *stress* está relacionado à criação de defeitos estruturais, que pode ser introduzido em filmes com alto teor de hidrogênio.

## NÍVEIS DE LANDAU NA PRESENÇA DE UMA DESLOCAÇÃO TIPO HÉLICE

*Cláudio Furtado e Fernando Moraes*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco  
50670-901 Recife-PE Brasil

*Palavras Chave:* defeitos topológicos, deslocações, níveis de Landau

Os estados quânticos de elétrons e buracos na presença de um campo magnético na direção  $z$  são conhecidos como níveis de Landau. Da solução da equação de Schrödinger para esse problema obtém-se que a energia dos elétrons (ou buracos) é quantizada na direção perpendicular ao campo e contínua na direção do campo. No nosso trabalho estudamos a influência de defeitos topológicos em propriedades eletrônicas de semicondutores. Investigamos o efeitos causados pela mudança da topologia do espaço com a introdução de defeitos lineares (deslocações). Deslocações são defeitos comumente encontrados em semicondutores. Estudamos elétrons e buracos na presença de uma deslocação tipo hélice submetidos a um campo magnético uniforme. Níveis de Landau em sistemas com defeitos tipo deslocação têm sido bastante estudados nos últimos anos. Nestas abordagens existentes na literatura o defeito é introduzido como uma perturbação tipo delta de Dirac no Hamiltoniano do problema. Na nossa abordagem utilizaremos a teoria de Kananaev-Volovich para descrever a deslocação no semicondutor. Nesta teoria todas as deformações causadas no meio elástico pelo defeito são introduzidas na métrica que descreve o meio elástico. Escrevemos a equação de Schrödinger na métrica que descreve uma deslocação tipo hélice. Utilizando as equações de Maxwell encontramos o potencial vetor que descreve uma configuração do campo uniforme na direção  $z$  na métrica do defeito. Introduzimos o potencial vetor na equação de Schrödinger através do acoplamento mínimo. Resolvemos a equação de Schrödinger para os níveis de Landau na presença de uma deslocação. Obtemos os autovalores e autofunções para o problema. Mostramos que a presença do defeito quebra as degenerescência dos níveis de Landau, resultado que as outras abordagens não conseguiam obter. Mostramos também a analogia dos níveis de Landau na presença de uma deslocação com o problema de um fluxo de Aharonov-Bohm na presença de um campo magnético uniforme.

## ESTRUTURA ELETRÔNICA DE DEFEITOS PONTUAIS EM SiC

*H. W. Leite Alves*

Depto. de Ciências Naturais - FUNREI, São João del Rei - MG

*Palavras-Chave:* semicondutores, estrutura eletrônica, defeitos

A implementação do crescimento controlado de cristais 3C-SiC (fase cúbica) por CVD ("Chemical Vapour Deposition"), durante a última década, propiciou um rápido desenvolvimento nas pesquisas para este composto como um material semicondutor para dispositivos eletrônicos operantes em altas temperaturas, altas potências e, ainda, resistentes à radiação, substituindo o diamante, que era o material mais promissor para estes propósitos. Neste trabalho, calculamos a estrutura eletrônica de vacâncias, anti-sítios e auto-interstícios neste sólido em sua fase cúbica. Para tal, usamos o modelo do aglomerado molecular em conjunto com o método Hartree-Fock de primeiros princípios, cujas funções de onda são expandidas em uma combinação linear de orbitais atômicos, sendo cada orbital atômico, por sua vez, expandidos por funções gaussianas (código GAUSSIAN 92). Nossos resultados mostram uma boa concordância com os dados experimentais e outros cálculos (utilizando ondas planas) para a rede "perfeita" de SiC. Para as vacâncias, além de obtermos os resultados previsíveis (do ponto de vista teórico), especulamos, com os nossos resultados, a possibilidade da existência de centros de baixo spin ( $S = 1/2$ ) envolvendo este defeito neste material. Comparando os resultados obtidos para estrutura eletrônica das vacâncias com a estrutura eletrônica dos outros defeitos, os nossos resultados mostram que as vacâncias são, conjuntamente com os anti-sítios, os defeitos que possuem maior estabilidade energética, ou seja, são os defeitos que podem ser encontrados no crescimento do 3C-SiC através de técnicas de deposição.

(FAPEMIG, CNPq)

## DISLOCATION GENERATION AT THE INTERFACE OF GaAs GROWN ON Si

*Fanyao Qu and Paulo César de Moraes*

Departamento de Física, Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: crescimento, dislocação, defeitos*

The generation and expansion of dislocation at the interface between GaAs and Si has been investigated using transmission electron microscope (TEM) and high resolution electron microscope (HREM). The epilayers of GaAs grown on Si were grown by metalorganic vapor phase epitaxy (MOCVD) and molecular beam epitaxy (MBE) techniques. Four possible forms of dislocation generation sources are found. They include the threading dislocations originally lying in the substrate, the nucleation of half dislocation rings near the interface, local concentration of strains and stress, local formation of dislocation loops. XTEM and HREM studies indicated that dislocations in GaAs/Si are neither pure screw dislocations nor pure helical dislocations, but  $60^\circ$  mixing dislocations and non-uniformly distributed microtwins along two directions. In this work we present the analytical formula of dislocation density. It is rigorously related to the heteroepitaxial growth temperature, misfit ratio of epitaxial layer and substrate, number of dislocations originally lying in the substrate and elastic deformation and the thickness of the epitaxial layer. The formula predicts that threading dislocations and microtwins at the GaAs/Si interface grow up along the direction of minimum elastic deformation. Good agreement between our experimental data and the results obtained from our formula is found. Indeed, it is expected that the analytical expression we found could be applicable to other semiconductor heterostructures as well.

(CAPES, FAP-DF, CNPq)

## HOLES INDUCED BY STRONG NEAR BAND GAP LIGHT IN GaAs:O.

*W. V. MACHADO, M.A. AMATO*

Dep.de Física-IC - UnB, 70910-900 Brasília-DF, Brazil

**Key words:** Gallium Arsenide, Photocurrent, Metastable state, Holes

**Abstract.** In this work some anomalies in the photoconductivity measurements in GaAs nominally doped with oxygen, when submitted to strong illumination with energies in the range 1.1eV to 1.5eV at temperatures below 150K are reported. We have identified them as being due to a metastable population of holes sitting at levels in the range 0.4eV to 0.7eV above the valence band. The main features observed is the spectral distribution centered at just about the band gap energy with some structure exhibiting evidence of the existence of levels at about 0.57eV, 0.63eV and 0.70eV above the valence band, with photosensitivity possibly assisted by replicas of 0.03eV phonons. The population of holes is sufficient to provoke an exchange from n-type to p-type under extrinsic excitation in the above energy range. It presents a exponential activation of 33.8meV with temperature below 80K and a deactivation of 42.9meV above that temperature. The difference between these values gives 76.7meV which seems to be related to a negative potential barrier to electron recapture into these centers. The photo-Hall data shows an electron level at 0.5eV below the conduction band which in this turn, may take part in the photo quenching phenomena. We therefore, put forward a model based on a level to level transition involving a shallow acceptor level 0.03eV above the valence band. Our data, however, do not allow us to assert whether the Photoquenching phenomena and/or Holes effect are linked or not to the supposed presence of oxygen, nominally introduced into the material.

(FAP/DF)

## CORRENTES DE DESPOLARIZAÇÃO TERMICAMENTE GERADAS EM $Al_xGa_{1-x}As$

*Luis Vicente de Andrade Scalvi<sup>1</sup>, Ligia de Oliveira<sup>1</sup>, Máximo Siu Li<sup>2</sup>*

1- Departamento de Física, UNESP-Campus Bauru, C.P. 473, Bauru SP 17033-360  
2- F.C.M. - Instituto de Física de São Carlos - U.S.P., C.P. 369, São Carlos SP 13560-970

**Palavras-Chave :** semicondutores III-V, defeitos, dipolos

Correntes obtidas a partir da despolarização termicamente estimulada (CDTE) em amostras de  $Al_xGa_{1-x}As$  nos levaram a sugerir a existência de mecanismos de relaxação dipolar nestas ligas. As energias de ativação para este processo estão na faixa 0,100 a 0,150 eV, da mesma ordem que a energia de ligação do centro DX, que apresenta estado fundamental com carga negativa alojado numa posição intersticial. Assim as bandas de CDTE têm sido associadas a mecanismos de relaxação envolvendo o centro DX. A interação com luz monocromática no experimento de CDTE, na faixa de 0,8 a 2,5 eV, tem apresentado peculiaridades que estão relacionadas a estes defeitos e também a outros estados de importância similar, particularmente em amostras de gap indireto. Resultados de resistência em função da temperatura no escuro e sob influência da luz monocromática mostram a participação do estado hidrogênico do vale X nas propriedades de transporte. Com relação ao espalhamento por dipolos, nossas simulações numéricas do decaimento de estados fotoexcitados mostram que este mecanismo não deve ter contribuição significativa. Para que este espalhamento se torne competitivo com o espalhamento por impurezas ionizadas, teria que existir uma interação de longa distância entre cargas opostas (que poderiam ser  $DX-d'$  ou  $V_{As}-d'$ ), ou uma concentração de dipolos superior à de impurezas ionizadas isoladas, o que não parece fisicamente compatível com nenhum dos modelos investigados até o presente. Neste trabalho apresentamos um resumo de nossa investigação de dipolos em amostras de  $Al_xGa_{1-x}As$  com os principais resultados experimentais, hipóteses e conclusões. Discutimos também como as técnicas de investigação utilizadas estão sendo empregadas para a caracterização de outros materiais semicondutores.

( CNPq, FAPESP )

## ESTADOS DE IMPUREZA TIPO-N EM SEMICONDUTORES $InSb$ DE GAP ESTREITO

*N.S.Dantas<sup>1</sup>, F.Mota<sup>1,4</sup>, S.Canuto<sup>4</sup>, A.Fazzio<sup>4</sup>, A.Alves<sup>1</sup>, I.Pepe<sup>1</sup>, A.F. da Silva<sup>3,4</sup>*

1-Instituto de Física-UFBA, 2-Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais-INPE, 3-Laboratório de Sensores e Materiais-LAS, 4-Instituto de Física-USP

**Palavras chave :** impureza, pares-tríades,  $InSb$

Neste trabalho, nós investigamos a formação de pares e tríades de impurezas e suas influências nas propriedades óticas e de transporte nos semicondutores do tipo  $InSb$ , dopados com impurezas doadoras. O interesse em tais estados de impurezas do  $InSb$  é devido ao seu uso na fabricação de dispositivos semicondutores, pontos quânticos, sensores para satélites, dispositivos de laser no infravermelho distante e também para a investigação da existência de uma banda de impurezas separada da banda de condução. É sabido que a energia de band-gap do  $InSb$  é de 0,23eV, o que o torna um semicondutor particularmente interessante para a fabricação de dispositivos de uso estratégico tais como os descritos acima. À 0 K os efeitos de tais aglomerados jogam um papel relevante nas propriedades óticas que ocorrem para energias próximas e ligeiramente abaixo da energia de ionização de uma impureza isolada (ou seja,  $E_i = 0,64 meV$ ). A transição Metal-Isolante para o sistema, não compensado, foi determinada, usando o critério de Mott, para uma concentração crítica  $N_c \cong 4,7 \cdot 10^{13} cm^{-3}$ . Também foi calculada a condutividade para concentrações de impurezas maiores que  $N_c$ , usando a condutividade mínima calculada  $\sigma_{min} = 0,47 (ohm.cm)^{-1}$ . Para o estudo da condutividade assumimos que os aglomerados (clusters) estão distribuídos aleatoriamente e usamos algumas funções de distribuição, tal como a função de Poisson, para o cálculo das energias de ionização. A existência dos Estados de Impurezas ( $H_2, H_{2+}, H_3, H_{3+}$ ) próximo à banda de condução pode ser comprovada por processos tais como fotocondutividade, absorção e tunelamento ressonante. Para o cálculo das energias de  $H_3$  e  $H_{3+}$  foram usadas as equações de campo auto-consistente de Hartree-Fock.

## FRAÇÃO DE OCUPAÇÃO DE SÍTIOS TETRAÉDRICOS E OCTAÉDRICOS EM NANOPARTÍCULAS DE $MnFe_2O_4$

Álvaro Luiz Tronconi<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>†</sup>, Francisco Augusto Tourinho<sup>‡</sup>, H.-D. Pfannes<sup>♦</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>♦</sup>Departamento de Física - ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, 30161-970 - Belo Horizonte - MG

*Palavras-Chave: ocupação de sítios, espectroscopia Mössbauer, nanopartículas magnéticas*

Nanopartículas de ferrita de manganês ( $MnFe_2O_4$ ) são atualmente produzidas por síntese química - processo mais eficiente e mais versátil que o processo mecânico de moagem. Os fluidos magnéticos têm sido produzidos pela dispersão coloidal de nanopartículas sintéticas de maguemita, ferrita de manganês e ferrita de cobalto. A estrutura cristalina da ferrita de manganês corresponde à estrutura de um spinélio. Normalmente, na célula unitária da ferrita de manganês, os oito cátions  $Mn^{2+}$  ocupam oito sítios octaédricos enquanto que os dezesseis cátions  $Fe^{3+}$  ocupam oito sítios octaédricos e oito sítios tetraédricos. Entretanto, em partículas nanométricas sintetizadas quimicamente, pode haver uma alteração na distribuição dos cátions  $Fe^{3+}$  entre os sítios tetraédricos e octaédricos, sensível ao diâmetro das nanopartículas. Espera-se, em decorrência, alterações no comportamento magnético das nanopartículas, em função do diâmetro das mesmas. Em particular, a dependência da constante de anisotropia magnetocristalina com o diâmetro das nanopartículas pode estar associada à variações na razão de ocupação do cátion  $Fe^{3+}$  em relação ao sistema bulk. A compreensão da dependência da anisotropia magnetocristalina com o diâmetro das nanopartículas tem interesse prático. Do ponto de vista prático as nanopartículas de ferritas são utilizadas para produção de fluidos magnéticos iônicos e as possibilidades de alteração de suas propriedades magnéticas abrem novas perspectivas para projetos de novos dispositivos. Neste trabalho a espectroscopia Mössbauer é utilizada para determinar a razão de ocupação dos sítios tetraédricos e octaédricos, por cátions  $Fe^{3+}$ , em nanopartículas de  $MnFe_2O_4$ .

(FAP-DF, PADCT, CNPq, FAPEMIG, FINEP)

## ESTUDO DE INTERAÇÕES INTERPARTÍCULAS EM FERROFLUIDO IÔNICO ATRAVÉS DA TÉCNICA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA.

Ana Rita Pereira<sup>\*</sup>, Paulo César de Moraes<sup>\*</sup>, Maria Cristina F. Lara<sup>\*</sup>, Álvaro Luis Tronconi<sup>\*</sup>, Francisco Augusto Tourinho<sup>\*</sup>, Fernando Pelegrini<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Departamento de Física - UFG, 74001-970 - GOIÂNIA - GO

<sup>\*</sup> Departamento de Física - UNB, 70910-900 - BRASÍLIA - DF

<sup>\*\*</sup> Departamento de Química - UNB, 70910-900 - BRASÍLIA - DF

*Palavras-Chaves: ferrofluido, interpartículas, ressonância magnética*

A técnica de ressonância magnética é empregada para estudar as interações magnéticas interpartículas em um conjunto de seis amostras de ferrofluido iônico de ferrita de manganês ( $MnFe_2O_4$ ). O estudo dessas interações está fundamentado na interpretação da largura de linha do espectro de ressonância magnética. Os dados obtidos para as amostras investigadas foram analisados tomando por base as variações das larguras de linha fornecidas pelos espectros de ressonância magnética. A variação da largura de linha de ressonância em função da temperatura, na faixa de 100 a 260 K, para as seis amostras, com concentrações de partículas variando de  $1,2 \times 10^{16}$  partículas/cm<sup>3</sup> a  $6,3 \times 10^{16}$  partículas/cm<sup>3</sup>, é interpretada em termos da energia de interação do momento magnético das partículas com o campo magnético externo, da energia de anisotropia magnética das partículas e da energia de interação dipolar entre as partículas. A variação da concentração leva a uma conseqüente variação da distância média entre as partículas. O modelo teórico aplicado à interpretação dos resultados experimentais fundamenta-se na teoria de Van Vleck para o cálculo do segundo momento da linha de ressonância magnética. A análise dos resultados experimentais mostra que, para as amostras de ferrofluido iônico investigadas, a variação da largura de linha de ressonância magnética, em função da temperatura, e também em função da concentração de partículas, para amostras congeladas constituídas por partículas esféricas, pode ser interpretada em termos da (a) energia de interação do momento magnético das partículas com o campo magnético externo, (b) da energia de anisotropia magnética das partículas e (c) da energia de interação dipolar magnética entre as partículas da amostra como um todo, isto é, por uma energia de interação dipolar magnética inversamente proporcional à sexta potência da distância média entre as partículas. O conjunto de resultados experimentais e sua interpretação mostra de fato várias possibilidades de estudo dos ferrofluidos iônicos com a técnica de ressonância magnética.

Apoio: CNPq, CAPES

## ESTUDO DA ANISOTROPIA MAGNÉTICA SUPERFICIAL EM NANOPARTÍCULAS ESFÉRICAS

*Andris Figueirôa Bakuzis<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>†</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: anisotropia de superfície, nanopartículas magnéticas*

Em sistemas magnéticos mesoscópicos a contribuição superficial à anisotropia magnetocristalina torna-se extremamente importante. É usual nesses casos separar as contribuições volumétrica e superficial da anisotropia magnetocristalina. Em geral, a análise da anisotropia de superfície é extremamente complicada por estar envolvido o "hopping" de elétrons entre orbitais do tipo d. O tratamento teórico implica no cálculo de diversas integrais, o que torna bastante difícil o procedimento de comparação dos resultados obtidos com resultados experimentais disponíveis na literatura. Neste trabalho é sugerido um modelo aproximado para o cálculo da anisotropia de superfície de nanopartículas magnéticas não-interagentes. A modelagem permite obter uma temperatura de transição magnética, identificada com a mudança de orientação dos momentos magnéticos atômicos da camada superficial. O modelo apresenta bons resultados para partículas esféricas onde os momentos magnéticos na camada superficial podem se encontrar num ordenamento do tipo "buckling". A aproximação consiste primeiramente em obter a magnetização reduzida para o sistema magnético. Em seguida admite-se que a anisotropia magnetocristalina possa ser representada por uma combinação linear de coeficientes de anisotropia. Os resultados do modelo são utilizados para ajustar os valores experimentais da anisotropia de superfície de partículas magnéticas nanométricas dispersa na forma de fluidos magnéticos. Os fluidos magnéticos analisados são constituídos de nanopartículas de ferrita de manganês suspensas em meio aquoso. Amostras contendo nanopartículas com diferentes diâmetros médios foram analisadas. Utilizando dados da anisotropia magnetocristalina efetiva obtém-se um gráfico para as temperaturas de transição magnética, correspondentes à reorientação dos momentos magnéticos da camada superficial, em função do diâmetro médio das nanopartículas magnéticas em suspensão no fluido magnético.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## CARACTERIZAÇÃO MAGNÉTICA DE NANOPARTÍCULAS DE FERRITA DE COBRE

*Cimei Borges Teixeira<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>†</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: nanopartículas magnéticas, anisotropia magnética, ressonância magnética*

Os fluidos magnéticos são produzidos através da dispersão de partículas magnéticas de dimensões nanométricas em um fluido carreador, na forma de sistemas ultra-estáveis, isto é, sistemas onde não ocorre a separação de fases sob ação de agentes tais como temperatura, força iônica, gravidade e campo magnético, dentro de certos limites. As nanopartículas magnéticas em suspensão nos fluidos magnéticos são atualmente produzidas por síntese química, processo mais eficiente e versátil que o processo de moagem. Os fluidos magnéticos conhecidos até bem pouco tempo são obtidos pela dispersão coloidal de nanopartículas sintéticas de maguemita, ferrita de manganês e ferrita de cobalto. A síntese de nanopartículas de ferrita de cobre ( $\text{CuFe}_2\text{O}_4$ ) e sua utilização para produção de fluidos magnéticos iônicos foi anunciada recentemente. Por outro lado, a técnica de ressonância magnética foi recentemente utilizada para determinar a constante de anisotropia magnetocristalina de nanopartículas magnéticas de ferritas de manganês dispersas em meio aquoso. A constante de anisotropia magnetocristalina das nanopartículas é de fundamental importância para a caracterização do respectivo fluido magnético. Do ponto de vista prático, o valor da constante de anisotropia é fundamental em projetos de dispositivos. Do ponto de vista fundamental a constante de anisotropia pode refletir o tipo de orientação dos momentos magnéticos atômicos na partícula. Com concentrações da ordem de  $10^{16}$  partículas por centímetro cúbico determina-se a anisotropia magnetocristalina da partícula magnética, ou seja, efeitos de interação partícula-partícula podem ser desprezados. Neste trabalho utilizamos a técnica de ressonância magnética, com campo externo não nulo e em frequências de cerca de 9 GHz, para determinar a anisotropia de nanopartículas de  $\text{CuFe}_2\text{O}_4$ . O comportamento da anisotropia magnética em função da temperatura segue qualitativamente o mesmo comportamento do material bulk, porém com dependência menos acentuada.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## UTILIZAÇÃO DA TÉCNICA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA PARA A DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE DE ANISOTROPIA DE NANOPARTÍCULAS DE $\text{NiFe}_2\text{O}_4$

*Juliana Ferreira Saenger<sup>†</sup>, Paulo César de Morais<sup>†</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: anisotropia magnética, ressonância magnética, nanopartículas magnéticas*

A produção de nanopartículas magnéticas representa uma etapa fundamental na produção de fluidos magnéticos. As nanopartículas magnéticas são atualmente produzidas por síntese química - processo mais eficiente e mais versátil que o processo de moagem utilizado no passado. Os fluidos magnéticos têm sido produzidos pela dispersão coloidal de nanopartículas sintéticas de maguemita, ferrita de manganês e ferrita de cobalto. A síntese de nanopartículas magnéticas à base de ferrita de níquel ( $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ ) e sua utilização para produção de fluidos magnéticos iônicos foi anunciada recentemente. A caracterização magnética das nanopartículas, juntamente com a caracterização microscópica são fundamentais para as aplicações em projetos de dispositivos. Neste sentido, a caracterização magnética pode ser feita pela determinação da constante de anisotropia magnetocristalina do material. A técnica de ressonância magnética foi recentemente utilizada para determinar a constante de anisotropia magnetocristalina de nanopartículas magnéticas de ferritas de manganês dispersas em meio aquoso. Utilizando-se concentrações de até  $2 \times 10^{16}$  partícula/ $\text{cm}^3$  determina-se a anisotropia magnetocristalina da partícula magnética, evitando-se efeitos de interação partícula-partícula. Neste trabalho utilizamos a técnica de ressonância magnética, com campo externo não nulo e em frequências de cerca de 9 GHz, para determinar a anisotropia de nanopartículas de  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ . As amostras de fluido magnético à base de nanopartículas de  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  são congeladas em presença de um campo magnético externo de cerca de 1 T. Medidas de variação angular do campo de ressonância do fluido congelado são utilizadas para a determinação da constante de anisotropia magnética.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## STUDY OF THE HYDROLYSIS OF TEOS-TMOS MIXTURES UNDER ULTRASOUND STIMULATION

*Dario Antonio Donatti, Dimas Roberto Vollet, Caio Eduardo de Campos Tambelli*  
Departamento de Física - Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP

*Keywords: TEOS-TMOS, sono-hydrolysis, mixtures*

The alkoxyde hydrolysis catalyzed by oxalic acid of mixtures of TEOS-water, TMOS-water and TMOS-TEOS-water was studied at 35°C under ultrasound stimulation by means of a flux calorimetry method developed in our Laboratory. The method is based on the time recording of the temperature uprising, with respect to the temperature of the medium under a steady state of heat flux between the ultrasound source and the external environment under circulating of a thermostatic bath, which accounts mainly for the hydrolysis reaction of the alkoxyde. In the TEOS-water system, is apparent a long induction time period, from the start of ultrasound action, before the hydrolysis peak sets. The induction period is explained by the initial immiscibility between water and TEOS. The ultrasound action forces the reaction to start and the product of the reaction (alcohol and silanol) helps the homogenization what enhances further the reaction. In the TMOS-water system, the induction period is practically absent so the reaction starts with its maximum rate. In the system in which the alkoxydes are mixed (TMOS-TEOS-water) it was found two independent peak of hydrolysis, each one at itself time and rate, with the same characteristic of the respective peak of the pure specie. The induction time for the hydrolysis peak associated to the TEOS is shortened as more alcohol is produced in the earlier hydrolysis of TMOS, what is easily explained by the homogenization effects.

(CNPq, FUNDUNESP, FAPESP)

## DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES DE AGREGADOS MICELARES EM DUAS DIMENSÕES

*Joaquim N. B. de Moraes e Wagner Figueiredo*  
Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina  
Florianópolis - SC

*Palavras-Chave:* potencial químico, micelas, simulações

O estudo das soluções aquosas diluídas de moléculas compostas por partes que são solúveis (parte hidrofílica) e partes que são insolúveis (parte hidrofóbica) em água constitui um capítulo da físico-química ainda não suficientemente compreendido do ponto de vista termodinâmico. Em particular, a transição de fases nestes sistemas ainda não está suficientemente caracterizada. Por exemplo, em agregados de micelas observados em duas dimensões, medidas da pressão osmótica em função da área efetiva disponível por molécula, à temperatura constante, parecem demonstrar a existência de uma transição de fases de primeira ordem. Entretanto essa caracterização não é muito clara tendo em vista que as isotermas observadas estão inclinadas em relação ao eixo das áreas. Neste trabalho estudamos um modelo de rede, onde as moléculas do surfactante são representadas por um conjunto de três sítios da rede, sendo que um deles representa a parte hidrofílica da molécula. Os outros pontos da rede são preenchidos com moléculas de água. Consideramos que as moléculas de água interagem de forma atrativa, o mesmo ocorrendo entre as cadeias dos surfactantes, enquanto que a interação entre moléculas de água e as cabeças dos surfactantes é repulsiva. Nesta simulação são consideradas redes com no mínimo dimensão linear igual a 100 para podermos satisfazer a condição de baixa concentração. Com esse modelo, calculamos a concentração micelar crítica, bem como o tamanho médio dos agregados micelares e sua correspondente dispersão para diferentes valores da concentração do surfactante e da temperatura. Finalmente comparamos nossos resultados, obtidos através de simulações, com aqueles derivados da igualdade dos potenciais químicos por molécula dos diversos agrupamentos micelares.

(CNPq e FINEP)

## MEDIDAS DE DIFUSIVIDADE TÉRMICA EM FERROFLUIDOS PELA TÉCNICA DE EFEITO MIRAGEM

*Amarildes Lorenzo Lôpo Dantas, Suhaila Maluf Shibli, Enio Ribeiro Salles*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

*Mauro Luciano Baesso*

Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá

*Palavras-chave:* difusividade térmica, efeito miragem, ferrofluidos

A técnica experimental conhecida como efeito miragem é um método de detectar ondas térmicas geradas em uma amostra por um feixe excitado. A absorção destes feixes induz a um gradiente do índice de refração do material na região opticamente aquecida. Investigando este gradiente com um segundo laser (feixe de prova) pode-se detectar uma deflexão (sinal miragem), a qual está diretamente relacionada à absorção óptica da amostra. A deflexão do feixe devida a mudança do índice de refração é detectada por um sensor de posição, o qual converte a deflexão em uma voltagem de saída. Esta técnica também é utilizada na obtenção da difusividade térmica dos materiais. Medidas térmicas em ferrofluidos utilizando a técnica de efeito miragem foram realizadas em nosso laboratório. Ferrofluido é uma suspensão coloidal de partículas magnéticas em um solvente portador. Esses colóides atraem cada vez mais interesse por causa de suas diversas aplicações tecnológicas. Utilizamos neste trabalho ferrofluido de maghemita ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ). A análise do sinal miragem relacionado à variação da frequência do feixe de excitação foi realizada. A curva obtida deste experimento tem a forma exponencial, concordando com a teoria do efeito miragem. O mesmo sinal é obtido para o inverso da raiz quadrada da frequência. A inclinação dessa curva é interpretada como sendo a raiz quadrada de  $\pi$  vezes a difusividade térmica. Neste caso particular a difusividade térmica calculada para ferrofluidos é da ordem de  $3,3 \times 10^{-3} \text{cm}^2/\text{s}$ . Resultados de estudos de difusividade térmica relacionada a variação na concentração do ferrofluido, tem mostrado que a difusividade térmica cresce com o aumento da concentração do ferrofluido.

## INFLUÊNCIA DO PH NA DISTRIBUIÇÃO DAS FORMAS MOLECULARES DA RODAMINA B EM SOLUÇÃO LÍQUIDAS ALTAMENTE CONCENTRADAS

Cristina M. Quintella<sup>1</sup> (PQ) (cristina@ufba.br), Ossamu Nakamura<sup>2</sup> (PQ)

Carlos França<sup>1</sup> (IC), Jair Pontes<sup>1</sup> (IC), Daniel Moreira<sup>1</sup> (IC)

<sup>1</sup> Dep. Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química, UFBA

<sup>2</sup> Dep. Física do Estado Sólido, Instituto de Física, UFBA

*palavras-chave:* espectroscopia de absorção fotoacústica, soluções líquidas,

Existe uma consciência crescente da necessidade de conhecer a forma molecular do reagentes utilizados nos processos laboratoriais e industriais, permitindo controlar o caminho cinético das reações e seus produtos e rendimentos otimizando a relação custo/benefício do produto final. Recentemente<sup>1</sup> demonstrou-se que a Espectroscopia de Absorção Fotoacústica é método ideal para estudar a distribuição relativa das formas moleculares do soluto presentes em soluções líquidas altamente concentradas. Estudos<sup>2</sup> demonstram claramente sua dependência com a concentração da solução e com a polaridade do solvente.

Este trabalho analisa a dependência da distribuição das formas moleculares de Rodamina B (RHB) com o pH da solução. RHB é um corante comumente utilizado tanto comercialmente como em métodos de análise. O pH foi variado de 1,04 a 13,46 ( $\pm 0,03$ ), em solução aquosa de 0,02 M, e controlado adicionando pequenas quantidades de HCl e NaOH. Foram observadas quatro formas moleculares absorvendo a  $402 \pm 1$  nm (RO),  $516 \pm 1$  nm (RB<sup>2-</sup>),  $575 \pm 1$  nm (RB<sup>-</sup>) e  $712 \pm 5$  nm (RB<sup>4-</sup>). O desvio crômico foi desprezível e a largura das bandas aumentou com o pH. Em pH ácido só existem as formas RB<sup>2-</sup> (82%) e RB<sup>-</sup> (18%). Quando o pH atinge 4,46, existe uma redução da forma RB<sup>2-</sup> (60%) enquanto a forma RB<sup>-</sup> passa a 22% e duas novas conformações moleculares aparecem, a RO (13%) e a RB<sup>4-</sup> (4%). Estes resultados concordam com os de Baraka<sup>3</sup>, utilizando LIF e baixa concentração.

Conclui-se que a distribuição das formas moleculares da RHB em soluções altamente concentradas pode ser controlada pela regulação do pH das soluções. (CNPq)

<sup>1</sup> Quintella, CM., Nakamura, O., França, D., Pontes, J., Neto, MMFA "Caracterização de Soluções Líquidas Altamente Concentradas" XXXV ABQ, 1995.

<sup>2</sup> Quintella, CM., Nakamura, O., França, D., Pontes, J., Neto, MMFA "Espectr. Fotoacústica em Fase Líquida", XVIII EFMC, 1995.

<sup>3</sup> Baraka, ME., et al, J.Photochem.Photobiol. A.Chem, 62 (1991).

## EFFECTS OF WATER QUANTITY IN THE SOLVENTLESS TEOS SONO-HYDROLYSIS

Dimas Roberto Vollet e Dario Antonio Donatti

Departamento de Física - Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP

*Keywords:* TEOS, sono-hydrolysis, water quantity

The acid and ultrasound catalyzed hydrolysis of solventless TEOS-water mixtures was studied by means of a flux calorimetry method as a function of the molar ratio  $r = [\text{water}]/[\text{TEOS}]$  ranging from 2 up to 10. A flux calorimeter operating under sonication conditions was specially designed for this purpose. This method has been able to resolve hydrolysis from condensation reactions, under acid conditions, by detecting the exothermal heat peak of the hydrolysis, that rises after a long induction period under ultrasound stimulation. The time for the maximum heat release is lightly increased as  $r$  changes from 2 to 10. The product of the reaction is not essentially the same as  $r$  varies as inferred by the modifications of the thermal properties of the medium after the hydrolysis has occurred. The system has shown a strong tendency to gel during the hydrolysis process for very low water concentration. After corrections by the changes of the heat flux caused by the mentioned variations of thermal properties of the medium, the normalized area under the peak (with respect to the TEOS quantity), which is proportional to the hydrolyzed quantity, is approximately the same with  $r$ . A little diminution in the hydrolyzed quantity is apparent for low  $r$  values, which accounts for an incomplete hydrolyzation because the lack of water, and for high  $r$  values, because the dilution effects would demand more time for a complete hydrolyzation.

(CNPq, FUNDUNESP, FAPESP)

## DETERMINAÇÃO DA CONSTANTE DE ANISOTROPIA MAGNETOCRISTALINA DE FLUIDOS MAGNÉTICOS DE FERRITAS DE COBALTO DOPADOS COM $\text{Cu}^{2+}$

Geraldo José da Silva<sup>†</sup>, Paulo César de Moraes<sup>†</sup> e Francisco Augusto Tourinho<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>Departamento de Física - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

<sup>‡</sup>Departamento de Química - Universidade de Brasília, 70910-900 - Brasília - DF

*Palavras-Chave: fluidos magnéticos, constante de anisotropia, ressonância magnética*

A constante de anisotropia magnetocristalina de fluidos magnéticos é tradicionalmente determinada através de medidas da magnetização e de decaimento da remanência. A técnica de ressonância magnética tem sido utilizada com sucesso na caracterização de propriedades físicas e físico-químicas de fluidos magnéticos. Como exemplos, a polidispersividade de tais amostras, o arranjo médio entre as partículas e especialmente a constante de anisotropia magnetocristalina em fluidos aquosos tem sido estudados por ressonância. Isto se aplica para os fluidos magnéticos à base de manganês, cobre, níquel e zinco onde o sinal de ressonância é o da própria partícula. Em se tratando das amostras de ferrita à base de Cobalto não se observa ressonância das amostras não-dopadas, o que é uma característica destas amostras de constante de anisotropia elevada. As medidas de ressonância foram feitas a temperatura de 250 K usando um espectrômetro de banda-X a uma frequência de 9,65 GHz. O procedimento utilizado foi dopar as amostras do fluido magnético iônico de  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  com uma solução aquosa do ion  $\text{Cu}^{2+}$ , a uma concentração molar conhecida e que não permitisse o aglomeramento das partículas, ou seja, que o fluido magnético se mantivesse monofásico. Com as partículas previamente alinhadas e em seguida congeladas fez-se a rotação angular em torno do campo de ressonância do ion  $\text{Cu}^{2+}$ . Os dados obtidos permitem estimar a constante de anisotropia magnética da amostra, a distância média entre as partículas e o arranjo espacial entre elas. Foi feito um estudo do comportamento da constante de anisotropia magnética em função da temperatura para a amostra. O valor do coeficiente que relaciona a constante de anisotropia magnética com o diâmetro das partículas foi estimado usando uma distribuição log-normal.

(FAP-DF, PADCT, CNPq)

## THERMALLY STIMULATED DEPOLARIZATION CURRENTS IN PVDF

*Sergei N. Fedosov*

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

*Taarig Ismail, Andrei M. Mirak'an, Alexandra E. Sergeeva*

Department of Physics, Odessa Technological Institute

**Palavras-Chave:** depolarization, ferroelectric polymers, electrets

Polarization and space charge phenomena in ferroelectric polymers were not given enough attention so far, in spite of their obvious importance. In this work, we applied the thermally stimulated depolarization (TSD) method in its two modifications called short circuit (SC) and open circuit (OC) modes in order to distinguish between relaxation of the polarization and that of the space charge. Uniaxially stretched 25  $\mu\text{m}$ -thick PVDF films were electroded from one side and poled in electric field of 60 MV/m either in a negative corona, or through a glass slide at 80-100 °C. Freshly poled samples have shown either one broad TSD peak at 70 °C in the SC mode, or two oppositely directed peaks at 55 °C and 95 °C in the OC mode. It was clear from position of the peaks that space charge was more stable than polarization. In poled samples stored for 16 months, double inversion of the TSD current in the OC mode has been observed while two well structured peaks appeared at 35 °C and 90 °C in the SC mode indicating that there were two components of polarization, both accompanied by space charge. The less stable part of polarization was attributed to the thermoelectret effect, while the more stable one had probably the ferroelectric origin. Our results have shown that very slow processes of polarization and space charge redistribution take place in ferroelectric polymers. The space charge provides for increased stability of polarization because it neutralizes the depolarizing field.

(FAPESP, ISF)

## UM MODELO PARA A POLARIZAÇÃO FERROELÉTRICA NOS COPOLÍMEROS P(VDF-TrFE) CONSIDERANDO A EXISTÊNCIA DE DUAS FASES FERROELÉTRICAS

*Neri Alves, José A. Giacometti\* e Luciana R. Meira*

Faculdade de Ciências e Tecnologia - UNESP, Presidente Prudente, SP.

Instituto de Física de São Carlos - USP, São Carlos, SP.

**Palavras-Chave:** Polímero Ferroelétrico, PVDF, P(VDF-TrFE), Polarização Ferroelétrica.

Há na literatura vários estudos confirmando a existência de duas fases ferroelétricas nos copolímeros P(VDF-TrFE), que contribuem de maneira diferente à ferroeletricidade. No entanto, os modelos para a dinâmica da polarização que não levam em consideração este fato. O presente trabalho trata-se da simulação de curvas do potencial de superfície durante carregamento no triodo de corona de corrente constante. Para tal, considera-se que a polarização em função do campo elétrico é dada por:  $P(E) = P_{R1} \tanh \alpha_1 (E - E_{C1}) + P_{R2} \tanh \alpha_2 (E - E_{C2})$ , onde considera-se que os parâmetros  $P_R$  (polarização remanente),  $E_C$  (campo coercivo) e  $\alpha$  (distribuição da polarização em torno de  $E_C$ ) são diferentes para cada fase, conforme sugere os estudos da estrutura destes polímeros. Desta forma consegue-se um ajuste perfeito das curvas de Potencial de Superfície obtidas com amostras de P(VDF-TrFE). Para o polifluoreto de vinilideno - PVDF, também deve-se considerar a contribuição de duas fases ferroelétricas para que seja possível ajustar as curvas de potencial de superfície. O PVDF pode apresentar-se em quatro fases diferentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$ , sendo que a amostra pode ter uma mistura destas fases e nossos resultados indicam que a polarização medida não é proveniente apenas da fase  $\beta$ , como usualmente tem sido considerado. Isto possivelmente se explica pela transição de regiões que se encontram fase  $\alpha$  para a fase  $\alpha_P$ , que também é polar, devido à ação do campo durante a polarização.

Apoio FAPESP, CNPq e FUNDUNESP

## INFLUÊNCIA DA CONFORMAÇÃO MOLECULAR DO PVDF NAS PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE FILMES SUBMETIDOS A IRRADIAÇÃO POR FEIXE DE ELÉTRONS.

*Lucas Fugikawa Santos e Roberto Mendonça Faria*  
Instituto de Física de São Carlos/USP

*Palavras-chave: feixe de elétrons; PVDF; conformação molecular.*

A técnica de irradiar materiais sólidos com feixe de elétrons tem se revelado um poderoso instrumento de pesquisa em áreas relacionadas com materiais isolantes. Nesse trabalho, pretendemos analisar os processos relacionados à emissão eletrônica secundária e a condutividade em materiais poliméricos, em particular o poli(fluoreto de vinilideno) - PVDF - em diferentes conformações moleculares. A irradiação por feixe de elétrons é um processo que simula uma situação em que a superfície de um material, sob alto vácuo, está submetida à incidência de elétrons de baixa energia. A determinação da curva de emissão eletrônica do material, obtida por meio de medidas de potencial de superfície e da corrente através da amostra durante a irradiação, juntamente com as energias de "crossing-over", permite que saibamos se o material irá se carregar ou não, evitando possíveis descargas elétricas devidas ao acúmulo excessivo de cargas. A injeção de elétrons nos materiais é feita por um canhão eletrônico de energia de aceleração variável (0.4 a 20 KeV), construído especialmente para o estudo das propriedades de emissão e armazenamento de cargas em dielétricos. As amostras utilizadas são confeccionadas a partir de filmes de espessura entre 25 e 50  $\mu\text{m}$  de PVDF em duas de suas possíveis conformações estruturais: a helicoidal, também conhecida como fase  $\alpha$ , e a trans-planar (fase  $\beta$ ). A conformação molecular de filmes de PVDF depende do grau de estiramento que o filme sofre após ser submetido a tração mecânica e pode ser verificada por medidas de difração de raios-X. As curvas de emissão secundária e as energias de "crossing-over"  $E_I$  e  $E_{II}$  dependem da conformação molecular. Esse estudo visa, portanto, estudar processos de transporte e armazenamento de cargas em PVDF e correlacionar as curvas de emissão secundária com a estrutura e a morfologia do material.

## ANÁLISE DOS MECANISMOS DE CONDUÇÃO EM POLIANILINAS E DERIVADOS

*Haroldo Naoyuki Nagashima<sup>1</sup> & Roberto Mendonça Faria<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>DFQ-UNESP-ILHA SOLTEIRA-SP

<sup>2</sup>IFSC-USP-SÃO CARLOS-SP

*Palavras-Chave: condutividade, polianilina, mecanismo de condução*

Os polímeros conjugados têm apresentado a característica única entre os materiais de variarem sua condutividade elétrica em até 13 ordens de grandeza. Com isso, essa classe de materiais apresenta hoje inúmeras aplicações tecnológicas, mas os mecanismos de condução eletrônica no volume do material não estão ainda bem compreendidos. Esse trabalho apresenta medidas de condutividade contínua e alternada em filmes de polianilinas e poli(o-metoxianilinas) em vários graus de dopagem, para diferentes campos aplicados e no intervalo de temperatura entre 4 e 300 K. Através dos resultados da componente real  $\text{Re}[\sigma^*(\omega)]$  podemos separar diferentes mecanismos de condução conforme a região de frequência das medidas. Na região de baixas frequências, a condutividade real é independente da frequência; acima de um valor crítico  $\omega_1$ , a condutividade cresce com  $\omega^n$  até um segundo valor crítico  $\omega_2$ , a partir do qual um segundo patamar de condutividade é observado. A condução em cada uma dessas regiões é governada por distintos mecanismos de condução, e o presente estudo visa correlacionar efeitos de localização de portadores, assim como a dimensionalidade da condutividade, com cada uma dessas regiões. Para frequências baixas, a condução é controlada pelo transporte eletrônico intermolecular, enquanto que para frequências muito elevadas o portador deve ficar confinado ao longo de uma molécula. Quanto maior o grau de dopagem, mais efetivo é o mecanismo de transporte intramolecular devido à geração de estados estendidos na molécula, e a condução é, em altas frequências, preferencialmente unidimensional. Em baixas frequências, a condutividade medida é pequena devido aos baixos valores de mobilidade dos portadores, que é resultado de sua deslocalização intermolecular, o que confere ao material uma condução tridimensional. A comparação das medidas da PANI e da POMA influenciam o mecanismo intermolecular, pois devido à presença do grupo metoxi, a distância média entre as moléculas se torna maior.

## MEASUREMENT OF POLARIZATION-FIELD HYSTERESIS IN FERROELECTRIC POLYMERS

*Sergei N. Fedosov, José A. Giacometti, Mauro M. Costa, Paulo A. Ribeiro*  
Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo  
*Xia Zhongfu*  
Poh Institute of Solid State Physics, Tongji University of Shanghai, China

**Palavras-Chave:** hysteresis, ferroelectric polymers, corona poling

Procedure for obtaining the polarization (P) - field (E) dependence in ferroelectric polymers is not as simple as in case of traditional inorganic ferroelectrics. Because of a relatively high Maxwell's relaxation time, one must carry out measurements at infra-low frequencies with the polarization component of the poling current appropriately separated from capacitive and conductive currents. Moreover, it is necessary to regard the low-frequency values of the dielectric constant ( $\epsilon$ ) and the apparent conductivity ( $\sigma$ ). The method described here is based on corresponding treatment of experimentally recorded kinetics of the electret potential during the constant-current corona poling and switching of polarization. First, P(t) and E(t) functions are retrieved and then the time (t) is excluded from the functions. Resultant P(E) curve has a form of the hysteresis loop, from which the coercive field  $E_c$  and the remnant polarization  $P_r$  can be easily retrieved. The method has been tested on commercial 25  $\mu\text{m}$ -thick PVDF films poled in a negative and a positive corona at a constant current of 100  $\mu\text{A}/\text{m}^2$  and under apparent frequency of  $3 \times 10^{-4}$  Hz. We obtained the following values :  $E_c = 48$  MV/m,  $P_r = 42$  mC/m<sup>2</sup>,  $\epsilon = 44$  and  $\sigma = 8 \times 10^{-14}$  Sm/m. Our calculations have shown that the error of about 80% occurs, if frequency dependence of the dielectric constant is ignored and existence of a measurable value of the conductivity neglected. The method is applicable to study P(E) hysteresis phenomena in any ferroelectric polymer. Its advantage is that values of the four important parameters of the material are obtained in only one experiment.

(FAPESP)

## CONDUTIVIDADE ALTERNADA EM COMPÓSITOS ORGÂNICOS-INORGÂNICOS

*Rodrigo F. Bianchi, Karim Dahmouche, Tito Bonagamba & Roberto M. Faria*  
DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP

**Palavras-chave:** ORMOLYTES, condutividade iônica, sistemas desordenados.

O presente trabalho tem por objetivo preparar o compósito híbrido orgânico-inorgânico denominado pelo termo geral de ORMOLYTE (organically modified electrolytes), pelo processo sol-gel, e estudar os mecanismos associados à sua condução iônica. O compósito é preparado pela mistura de 3-isocianatopropiltrietoxissilano (IsoTrEOS), 0,0'-bis-(2-aminopropil)-polipropilenoglicol e sal de lítio ( $\text{LiClO}_4$ ). Esse material apresenta alta estabilidade quando comparado aos ORMOLYTES convencionais por apresentar ligações químicas entre as fases orgânicas e inorgânicas. Serão preparadas amostras com diferentes concentrações de  $\text{Li}^+$ , que é o portador iônico de condução desses sistemas. As medidas de condutividade alternada  $\sigma''(\omega)$  são realizadas na faixa de 0,1 a  $10^5$  Hz, em temperaturas que variam de 4 a 300 K, usando-se um impedanciômetro Solartron. Tanto a componente real quanto a imaginária da condutividade  $\sigma''(\omega)$  variam com a frequência, e os resultados podem ser explicados pelo modelo de "hopping" em um meio desordenado, onde a distribuição da intensidade de barreiras de potencial  $W$  é aleatória. Esse modelo, que apresenta forte dependência sobre a distância média  $r$  entre os estados de permanência dos portadores iônicos, foi desenvolvido por Dyre usando a aproximação do Passeio ao Acaso Contínuo no Tempo (CTRW), e pressupõe que o transporte é devido a "hopping" estimulado por fônons em sistemas sólidos desordenados. O ajuste teórico-experimental permite a obtenção de parâmetros característicos do material, como tempo de espera dos portadores nos estados localizados e sua mobilidade, assim como sua dependência com a temperatura.

(FAPESP)

*C. L. Sangiorge\* e O. de O. Damasceno#*

\*CEFET, Av. Amazonas 5253; #CEFET, Av. Amazonas 7667, C.E.P. 30180-001, B.H., M.G., Brasil

*A. L. Silva*

Engenharia Química, UFMG, Rua Espírito Santo 35, sala 613, C.E.P. 30160-030, B.H., M.G., Brasil

*A. L. de Oliveira*

Departamento de Física, ICEX, UFMG, C.P. 702, C.E.P. 30161-970, B.H., M.G., Brasil

### **Diesterato de Poli(Etileno Glicol-400)/MClO<sub>4</sub> (Distpeg/ MClO<sub>4</sub>) estudado por Calorimetria de Varredura Diferencial (DSC)**

*Palavras-chave:* Calorimetria de Varredura Diferencial (DSC), Diesterato de Poli(Etileno Glycol)/MClO<sub>4</sub>, Eletrólito Polimérico

A técnica de DSC permite determinar parâmetros de interesse, tais como temperaturas de fusão ( $T_m$ ), de transição vítrea ( $T_g$ ) e entalpias de fusão.

Levantamos curvas de DSC para dois eletrólitos poliméricos por nós preparados a diferentes concentrações, Distpeg/LiClO<sub>4</sub> e Distpeg/NaClO<sub>4</sub>.

Nossos resultados mostram, para os dois sistemas, um  $T_m$  bem característico, em toda a faixa de concentração, e  $T_g$ 's afetados pela presença de fases cristalinas e concentração do sal. Observamos também que o aspecto de dois picos, um a  $-9^\circ\text{C}$  e outro a  $+3^\circ\text{C}$ , presentes na amostra pura, variam com a concentração dos sais complexados, provavelmente devido à solvatação do cátion pelas unidades de polióxido de etileno.

Valores de  $T_g$  em função da concentração, para os sistemas Distpeg/LiClO<sub>4</sub> e Distpeg/NaClO<sub>4</sub>, foram correlacionados entre si e ambos com resultados de condutividade. (FAPEMIG, FINEP, CNPq)

### **ESPECTROMETRIA DE MASSAS DE POLIMEROS UTILIZANDO LUZ SINCROTRON**

*Ana Cecília de Azevedo e Souza e Gerardo Gerson Bezerra de Souza*  
*Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro*

*Palavras-chave:* luz síncrotron, polímeros, espectrometria de massas

Desenvolveu-se um estudo sistemático de polímeros irradiados com luz síncrotron no Center for Advanced Microstructures and Devices (CAMD), na Louisiana State University, USA.

Espectros de fotoabsorção para uma série de polímeros foram determinados utilizando um monocromador de duplo cristal, nas bordas 1s do S e Cl. Utilizando a luz branca da linha brasileira TGM instalada no CAMD irradiamos as seguintes amostras: PMMA, PVDC, PPS, PPL, UPVC, E-CTFE dentre outras. O processo de fragmentação foi estudado utilizando-se inicialmente a técnica de espectrometria de massas com o uso de um espectrometro de massas tipo quadrupolar. Pode-se observar que as amostras mostraram-se extremamente sensíveis a irradiação. A intensidade dos diferentes fragmentos foi medida em função do tempo, com e sem luz síncrotron. Observa-se também que o processo de decaimento após o desligamento da luz síncrotron é diferente para cada tipo de fragmento estudado. Numa etapa posterior, irradiamos as mesmas amostras numa outra linha de luz, sem monocromador (luz branca e feixe direto), em vácuo e sob diferentes atmosferas (SF<sub>6</sub>, CF<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, CF<sub>4</sub>+O<sub>2</sub>) para observar os danos causados pela luz síncrotron na superfície dos polímeros. Estes resultados foram estudados com o uso de um microscópio.

(CNPq, CAMD, LNLS).

## COMPORTAMENTO DA CONSTANTE DIELÉTRICA DA POLIURETANA EM FUNÇÃO DA FREQUÊNCIA E TEMPERATURA.

*Darcy Hiroe Fuji Kanda, José Antônio Malmonge e Walter Katsumi Sakamoto*  
Departamento de Física e Química / UNESP - Campus de Ilha Solteira

*Palavras-Chave:* constante dielétrica, poliuretana, relaxação dipolar

Estudo de propriedades dielétricas de filmes finos de poliuretana derivada do óleo de mamona (PU) obtidos pelo método de "spin coating" foram feitos em função da frequência e temperatura, usando uma ponte de impedância HP 4192A conectada ao dispositivo HP 16451B, para medidas de constante dielétrica. As amostras foram metalizadas com alumínio. O intervalo de frequência foi de  $10 \text{ Hz} < f < 13 \text{ MHz}$  e da temperatura entre  $30^\circ\text{C} < T < 60^\circ\text{C}$ . As medidas foram feitas em isotermas. No gráfico de  $\log \epsilon''$  versus  $\log f$ , observou-se um regime de condutividade dc com declividade de -1, originando uma dependência com a frequência para  $\epsilon''$  proporcional a  $(f/2\pi)^{-1}$ . A remoção da contribuição da condutividade dc, mostrou um pico na curva para a frequência de 300Hz e temperatura de  $60^\circ\text{C}$ . Verificou-se um deslocamento do pico para mais alta frequência correspondendo a um declínio da temperatura. Por outro lado, medidas de TSDC (Thermally Stimulated Depolarization Current) e DSC (Differential Scanning Calorimetry), mostraram que a temperatura de transição vítrea  $T_g$  da poliuretana derivada do óleo de mamona, associada ao pico de relaxação  $\alpha$ , localiza-se na região de  $55^\circ\text{C} < T < 65^\circ\text{C}$ , dando-nos o indício de que o pico observado em 300Hz e temperatura de  $60^\circ\text{C}$ , está associado com a perda dielétrica. Ainda, da análise das curvas de constante dielétrica para as mesmas condições de frequência e temperatura consideradas acima, concluímos que a forte dependência da mesma com a frequência, é devida à condutividade dc.

(FUNDAÇÃO BANCO DO BRASIL - FBB)

## CONDUTIVIDADE ALTERNADA EM POLI(O-METOXIANILINA)

*Carlos Maurício Lepiensi*  
Departamento de Física/UFPR

*Luiz Henrique C. Mattoso*  
CNPDIA/EMBRAPA/São Carlos-SP

*Roberto Mendonça Faria*  
DFCM/IFSC/USP/São Carlos-SP

*Palavras-chave:* poli(o-metoxianilina), condutividade AC, sistemas desordenados.

Medidas de condutividade AC -  $\sigma^*(\omega)$  - no intervalo de 0,1 a  $10^5$  Hz foram realizadas em filmes de poli(o-metoxianilina) (POMA) com diferentes graus de dopagem. Curvas da componente real da condutividade  $\text{Re}[\sigma^*(\omega)]$  se mostraram independente da frequência na região de baixas frequências ( $\sigma_{DC}$ ), e acima de um determinado valor  $\omega_c$ , essa componente obedeceu, aproximadamente, à relação  $\sigma^*(\omega) \text{ vs } \omega^p$ , que é o comportamento "quase-universal" obtido por Pollak-Geballe, válido para uma grande variedade de sólidos. Observou-se que quanto mais condutiva era a amostra, maior foi o valor de  $\omega_c$  encontrado, tornando mais extenso o patamar  $\sigma_{DC}$ . Os resultados das amostras de POMA, para diversos níveis de dopagem, foram semelhantes aos observados em meios desordenados, mas devido à característica que possui a dinâmica de dopagem química da POMA, onde ilhas condutoras são formadas devido à segregação de moléculas dopantes (HCl), desenvolvemos um modelo que leva em conta a dispersão de grãos condutores em uma matriz de sistema desordenado isolante. Na região condutora considerou-se, baseado em resultados de amostras fortemente dopadas, um comportamento de condução tipo Drude; enquanto que na região não-condutora desordenada usamos o modelo de Dyre desenvolvido para mecanismos tipo "hopping" eletrônico com distância média de saltos  $r$  e de distribuição aleatória de barreiras de potencial  $W$ . Esse modelo, válido para valores abaixo do limiar de percolação, permitiu um bom ajuste dos resultados experimentais das componentes real e imaginária de  $\sigma^*(\omega)$ , e da obtenção de importantes parâmetros elétricos do material.

(FINEP)

## MODIFICATIONS IN PPS INDUCED BY FAST IONS AND ITS DEPENDENCE WITH THE PRIMARY-ION STOPPING POWER

Lucio S. Farenzena<sup>a</sup>, Rogério P. Livi<sup>a</sup>, Marco A. Araújo<sup>b</sup>, Ricardo M. Papaléo<sup>c</sup>, A. Hallén,  
Bo U. R. Sundqvist

Institute of a) Physics and b) Chemistry, Federal University of Rio Grande do Sul and  
c) Division of Ion Physics, Department of Radiation Sciences, Uppsala University

*Palavras-chave:* ion tracks, polymers, spectroscopy.

Thin poly(phenylene sulphide) foils were bombarded with  $^1\text{H}^+$  (380 keV), and with 0.61 MeV/amu  $^4\text{He}^{2+}$ ,  $^{12}\text{C}^{2+}$ ,  $^{16}\text{O}^{3+}$ ,  $^{32}\text{S}^{3+}$ ,  $^{79}\text{Br}^{9+}$  and  $^{127}\text{I}^{14+}$  ions. In order to maintain the same ion track size for all impacting ions, their initial velocity was kept constant at 1.1 cm/ns (except  $^1\text{H}^+$ ). Under these conditions the deposited energy density in a single ion track changes as a result of the varying stopping power ( $dE/dx$ ) of the projectiles in the material. Fourier transform infrared spectroscopy and UV-visible spectroscopy were used to characterize the irradiated targets. Damage cross section  $\sigma$  for different chemical bonds, such as C-S and ring C-C bonds, are extracted from the IR data. For all analyzed IR bands, the values of  $\sigma$  scale roughly with the square of  $dE/dx$  (energy density in a single ion track). The absorption of the irradiated samples in the visible and UV region increases as a function of fluence. The rate of increase of absorption at a particular wavelength scales also as  $(dE/dx)^n$  with  $n \approx 2$ . We have made also some calculations using two models: the Hit model and a critical energy density approach based on the Hit model and we present a comparison with the models and the experimental results.

(CNPq, FINEP, FAPERGS)

## Caracterização morfológica do poli(p-fenileno sulfeto),(PPS) e suas blendas com um cristal liquido polimérico (LCP), o HX4000.

Marta Bueno de Moraes, Rosario Elida S. Bretas  
IFSC-USP, DEMa-UFSCar

*Palavras-Chave:* LCP, orientação, condutividade

O polímero potencialmente condutor, PPS, quando dopado com TCNQ tem sua condutividade elevada de  $10^{-16}$  a  $10^{-8}$  S/cm. O aumento na orientação das cadeias do polímero pode levar a um aumento na condução do portador de carga dentro da cada molécula e também entre moléculas. Os cristais líquidos poliméricos, os LCPs, são materiais de moléculas rígidas as quais se mantêm organizadas no estado fundido. Uma mistura deste material com o PPS pode levar a uma orientação das cadeias deste polímero já no estado fundido e então manter-se orientado quando resfriado. Esta blenda é chamada de "compósito molecular" por que neste compósito a "fibra" ou reforço é a molécula rígida do LCP e a sua dimensão é molecular.

O objetivo deste trabalho foi a caracterização morfológica destes compósitos antes e após a dopagem com o dopante TCNQ, de forma que pudéssemos estabelecer qual a interação entre os dois polímeros em termos da orientação de um na presença do outro, a morfologia resultante e só então posteriormente avaliar o efeito sobre a condutividade elétrica.

As blendas de PPS foram caracterizadas pelas seguintes técnicas: Microscopia ótica de luz polarizada com estágio à quente (MOLP), difração de raios X, microscopia de varredura (MEV), infravermelho (IR), calorimetria diferencial de varredura (DSC), análise térmica dinâmico mecânica (DMTA). A técnica de microscopia ótica indicou a orientação do PPS pelo LCP acima de uma dada concentração deste último na blenda: a difração de raios X parece confirmar, pelo menos qualitativamente, um maior cristalização do PPS na blenda com maior concentração de LCP. Apesar destas técnicas indicarem imiscibilidade entre os dois polímeros na blenda, juntamente com os dados de DSC e DMTA, a técnica de IR parece indicar uma miscibilidade ao menos parcial.

## THE P-TYPE CONDUCTIVITY IN AMORPHOUS PPS

EDINILTON MORAIS CAVALCANTE

Depto. de Física e Química, Faculdade de Engenharia, UNESP, Ilha Solteira - Sp.

**Palavras - Chave:** poly(p -phenylene sulfide) ( PPS) , electrical conductivity of poly( p-phenylene sulfide), Poole - Frenkel effect

The conductivity of poly(p-phenylene sulfide) (PPS) amorphous samples sandwiched between metallic electrodes has been studied as a function of applied voltage, temperature, and electrode material. The voltage (U) dependence of the currents for electric fields within the range  $10^3 - 10^6$  V/cm exhibits  $\exp \beta U^{1/2}$  behavior with  $\beta = \beta_{\text{Schottky}}$  below the glass transition temperature ( $T_g = 90^\circ\text{C}$ ), and  $\beta = \beta_{\text{Poole-Frenkel}}$  above  $T_g$ . Coordinated temperature measurements of dc currents with different metallic contacts and thermally stimulated currents ( TSC ) indicate, however, that the conductivity at  $T < T_g$  is consistent with the so-called " anomalous" Poole - Frenkel effect rather than the Schottky effect. Consequently, the p - type conductivity in amorphous PPS is proposed to be a bulk - limited process due to ionization of two different types of acceptor centers in the presence of neutral hole traps.

## DIPOLAR RELAXATION IN CORONA POLED POLYSTYRENE-DR1 GUEST-HOST POLYMERS

*José A. Giacometti, Mauro M. Costa, Paulo A. Ribeiro, Sergei N. Fedosov*  
Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

**Palavras-Chave:** dielectric relaxation, corona poling, NLO polymers

Guest-host systems with a chromophore dispersed in an amorphous polymer matrix possess nonlinear optical (NLO) properties. However, the nature of their relaxational behavior is not presently understood. In this work, we report on experimental results obtained with the polystyrene - dispersed red (DR1) system containing from 0.5% to 3% of the chromophore. Samples of 20-25  $\mu\text{m}$  thickness were produced by spin-coating and conditioned at  $70^\circ\text{C}$  for several hours. Differential scanning calorimetry (DSC) was performed to study effect of the DR1 on the glass transition temperature ( $T_g$ ). AC dielectric spectroscopy was applied in the range of temperatures from  $30^\circ\text{C}$  to  $140^\circ\text{C}$  and at frequencies from 100 Hz to 5 MHz in order to study the shape of the dielectric relaxation peak and its correspondence to Cole-Cole and Havriliak-Negami theoretical expressions. Constant-current corona poling was applied to obtain data on polarization and electret potential buildup and to make conclusions on dynamics of the polar chromophore groups alignment, while absorption and thermally stimulated currents (TSD) were measured to get information on activation energies and distribution functions of relaxation times. All studied processes of relaxation have shown non-Debye behavior with the decay curves well fitted to either a Kohlrausch-Williams-Watts (KWW) stretched exponential, or a biexponential function. Based on the experimental results, the composition of the polymer and poling conditions for best dipolar alignment have been found.

(FAPESP)

## DIELECTRIC RELAXATION IN PVDF-BaTiO<sub>3</sub> COMPOSITES

*Sergei N. Fedosov*

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

*Andrei M. Mirak'an, Taarig Ismail*

Department of Physics, Odessa Technological Institute, Ukraine

*Polycarpos Pissis*

Department of Physics, National Technical University of Athens, Greece

**Palavras-Chave:** relaxation, ferroelectric polymers, composites

Relaxation processes in composites are not a simple superposition of those observed in pure components. In our case, PVDF-BaTiO<sub>3</sub> composites prepared by hot pressing were studied by thermally stimulated depolarization (TSD) and AC dielectric spectroscopy methods at temperatures from -160 °C to +100 °C and frequencies from 100 Hz to 5 MHz. Three relaxation processes were identified, namely  $\alpha$ -relaxation in amorphous phase of PVDF,  $\beta$ -relaxation in the glassy state of the polymer and the interfacial or space charge relaxation. A non-Debye TSD  $\alpha$ -peak around -45°C indicated that there was a broad distribution of relaxation times. The same process gave rise to a  $\epsilon''(f)$  peak during the AC dielectric measurements. The peak appeared at -20 °C and 50 kHz compared to 30 kHz in pure PVDF, showing a weak anti-plasticizing effect of the filler. Our experimental data corresponded to Cole-Davidson and Havriliak-Negami theoretical expressions. The  $\alpha$ -relaxation was believed to be caused by micro-Brownian motions of segments of the main polymer chain, while the  $\beta$ -relaxation, seen as a broad TSD peak at -135 °C corresponded most probably to the local-mode motions in the glassy state of PVDF. The space charge peak at 60-100 °C has been explained in the framework of the phenomenological model stipulating existence of charge trapping during the buildup of the ferroelectric polarization in BaTiO<sub>3</sub> particles of the composite.

(FAPESP, ISF, INTAS)

## INTERCALAÇÃO EM FILMES FINOS AMORFOS DE $V_2O_5$

F. D. Origo<sup>1</sup>, A. Lourenço<sup>1</sup>, M. Tabacnicks<sup>2</sup>, M.C.A. Fantini<sup>2</sup> e A. Gorenstein<sup>1</sup>

<sup>1</sup>DFA/IFGW/UNICAMP, CP 6165 CEP 13084-970 Campinas SP, e-mail: annette@ififi.unicamp.br

<sup>2</sup>Instituto de Física USP, CP 66318, CEP 05389-970 São Paulo

**Palavras-Chave** : pentóxido de vanádio, filmes finos, eletrocromismo

Os óxidos de vanádio são materiais de grande interesse tanto para aplicações eletrocromicas quanto em baterias recarregáveis de alta densidade. As estequiometrias mais conhecidas destes óxidos são:  $VO_2$ ,  $V_6O_{13}$  e  $V_2O_5$ . Neste trabalho, o pentóxido de vanádio foi estudado na forma de filme fino, depositado pela técnica de sputtering reativo ( $Ar + O_2$ ) a partir de um alvo metálico de vanádio. Os filmes foram depositados com diferentes fluxos de oxigênio ( $\phi$ ), mantendo-se os outros parâmetros constantes..

Analisados por difração de raios-X, os filmes apresentaram estrutura amorfa. O recozimento à  $300^\circ C$  promoveu a cristalização dos filmes. A posição dos picos de difração, contudo, não coincide com nenhum dos óxidos tabelados no JCPDS. A composição das amostras "as-grown" foi analisada por "Rutherford Backscattering" (RBS). A razão O/V obtida variou entre  $2.41 \pm 0.05$  para baixos  $\phi$  à  $2.62 \pm 0.07$  para altos  $\phi$ , evidenciando a predominância do pentóxido de vanádio para todos os filmes. As propriedades ópticas das amostras foram analisadas por espectrofotometria na faixa visível-infravermelho próximo. O gap óptico apresentou um valor próximo de 2,4eV, para  $\phi > 1.25$  scc/min. O comportamento óptico das amostras durante intercalação/deintercalação de lítio foi estudada "in situ" (eletrólito  $LiClO_4/PC$ ). Com o aumento do grau x de intercalação (estequiometria  $Li_xV_2O_5$ ), a transmitância T decresce para comprimentos de onda maiores que  $\lambda = 470$  nm, mas cresce na faixa 300 - 470 nm. Contudo, para valores de x maiores que 0.45, o inverso ocorre: T cresce para  $\lambda > 470$  nm, decrescendo para  $\lambda < 470$  nm. Além disto, observou-se um alargamento aparente do gap óptico com o aumento de x. Estes resultados podem ser discutidos considerando-se a estrutura de banda do  $V_2O_5$  cristalino, que apresenta uma sub-banda de estados localizados à 0,6 eV abaixo da banda de condução. O valor de transição  $x=0.45$  encontrado é próximo aos valores da literatura para o preenchimento desta subbanda.

(CNPq, FINEP)

## Reflexão de Ângulo Rasante na Caracterização de Bicamadas

*José B. de Campos e Roberto R. de Aveliz*

*Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia - PUC/RJ*

*Jean Pierre Von der Weid*

*CETUC - PUC/RJ*

*Palavras-chave: Reflexão de ângulo rasante, bicamadas, níquel/silício.*

A técnica de reflexão de ângulo rasante (grazing incidence reflection) se baseia no fenômeno da reflexão de raios-x em sistemas de multicamadas. Dentro deste sistema podemos imaginar que um feixe penetra na primeira camada e sofre um desvio angular relacionado com a diferença entre os índices de refração na interface vácuo/camada. A partir daí, o feixe propagante atinge a interface seguinte, ocorrendo o mesmo processo, onde parte do feixe é transmitido e parte refletido. A partir do estudo destas múltiplas reflexões foi possível desenvolver um programa de simulação para este tipo de varredura, que permite obter informações sobre espessura, qualidade de interface e rugosidade.

O sistema de Níquel / Silício foi o escolhido para a caracterização em ângulo rasante. Sabe-se que estes filmes quando sofrem uma transformação de fase dependente da temperatura de tratamento. Os filmes foram depositados por feixe de elétrons, obtendo-se camadas de 300 ângstroms de espessura. Utilizou-se um difratômetro de duplo cristal com fonte de cobre onde o ângulo de varredura variou entre  $0.5^\circ$  e  $10^\circ$ , com um tempo de coleta de dados de 1,0s e passo de 0,003 arcs segundo. Os tratamentos térmicos foram realizados à uma taxa constante de  $20^\circ C$ , à temperatura de  $320^\circ C$ , com tempos 10, 20, 40, 80 e 100m. Com isso foi possível acompanhar a evolução do processo de interdifusão das camadas ao longo do tempo, verificando-se a formação de uma nova camada. A comparação do espectro experimental com a simulação nos ajudou a acompanhar todo o processo.

(FINEP, CAPES, CNPq)

## CORRELAÇÃO ENTRE AS PROPRIEDADES ÓTICAS E A MICROESTRUTURA DE FILMES DE $\text{KBr}:\text{Cu}^+$ EM DIFERENTES TEMPERATURAS DO SUBSTRATO.

*Ligia de Oliveira<sup>1</sup>, Marcelo A.P. Silva<sup>2</sup>, Máximo Siu Li<sup>2</sup>.*

<sup>1</sup> Departamento de Física - Faculdade de Ciências - Universidade Estadual Paulista de Bauru - C.P. 473 - CEP 17033-360, <sup>2</sup> Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo - C.P. 369 - CEP. 13560.

*Palavras-Chave* - Absorção Ótica, defeitos, policristalinos.

A alta dopagem de ions  $\text{Cu}^+$  ( $10^{20}$  a  $10^{21}$  átomos/cm<sup>3</sup>) em filmes de KBr é a principal característica destes materiais. A alta dopagem acontece quando estes materiais são crescidos pelo método de evaporação térmica a partir dos pós de KBr e CuBr (como dopante), dando origem a filmes policristalinos, com estrutura do KBr, onde o ion  $\text{Cu}^+$  ocupa uma posição fora de centro [1,2]. Esta propriedade dá origem a uma intensa banda de absorção em 278 nm, com coeficiente de absorção da ordem de  $10^4$  cm<sup>-1</sup> e meia de 24 nm para filmes de KBr + 1% CuBr de aproximadamente 1µm de espessura e crescidos sobre substrato à temperatura ambiente. Esta característica abre a possibilidade de aplicação em filtros na região do ultra-violeta. Com o objetivo de melhorar a qualidade ótica destes filmes, estudamos as propriedades óticas e a microestrutura de filmes de  $\text{KBr}:\text{Cu}^+$  crescidos em cinco diferentes temperaturas do substrato, no intervalo de 292K a 491K, chegando a um valor máximo de 491K. A correlação entre ambos os resultados mostra um aumento da densidade de grãos e do coeficiente de absorção a medida que a temperatura do substrato é elevada de 292 K a 374K.

[1] - L. Oliveira, C.M.G.S. Cruz, M.A.P. Silva e M.Siu Li, Thin Solid Films, 250 (1994) 273.

[2] - L. Oliveira e M. Siu Li, Thin Solid Films, 268 (1995) 30.

## EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE $\text{In}^+$ NA ABSORÇÃO ÓPTICA DE FILMES DE $\text{KCl}:\text{In}$

*E.A.A.Rubo(\*), M.S.Li(\*\*), R.M.F.Scalvi(\*) e L.Oliveira(\*)*  
(\* )Depto. Física - UNESP/Bauru - (\*\* )IFSC - USP/São Carlos

*Palavras-Chave* : halogenetos alcalinos, defeitos, absorção ótica

O estudo de defeitos atribuídos a impurezas em filmes de halogenetos alcalinos, têm trazido novos resultados em relação às suas propriedades óticas [1]. No presente trabalho verificamos o efeito da concentração de  $\text{In}^+$  na absorção ótica de filmes de KCl, preparados por evaporação térmica. Os filmes foram obtidos a partir da evaporação de uma mistura em pó de KCl e In, este último em concentrações de 0,5, 1,0, 1,5 e 2,0 mol%, sob substratos de quartzo, à pressão de  $5 \times 10^{-6}$  Torr. A absorção ótica dos filmes foi medida num espectrofotômetro Cary 17, às temperaturas de 300 e 77K. A espessura dos filmes, determinada num perfilômetro Talystep, se manteve entre 2 e 3µm. À temperatura de 300K, as curvas apresentaram uma banda de absorção com pico em 228nm, indicando que a densidade ótica, para esse comprimento de onda, aumenta com o aumento da concentração da impureza. À temperatura de 77K, as curvas parecem indicar, além do pico em 228nm, uma outra banda em torno de 250nm. Segundo a literatura, em cristais de  $\text{KCl}:\text{In}$ , obtidos a partir de KCl e  $\text{InCl}$  [2], a banda de absorção em 228nm é atribuída à presença de  $\text{In}^+$  e, a banda em 250nm, a pares de  $\text{In}^+$ . Por outro lado, medidas de CDTE em cristais de  $\text{KCl}:\text{In}$ , obtidos a partir de KCl e  $\text{InCl}_2$  [3], apresentam um pico de relaxação dipolar elétrica em 136K. Tal comportamento pode representar o efeito fora de centro do ion  $\text{In}^+$  na matriz de KCl. Pode-se concluir, em princípio, que os filmes crescidos por evaporação térmica, apresentam propriedades óticas similares ao cristal. (CNPQ, CAPES, FINEP, FAPESP)

[1] L. Oliveira e M.S.Li, Thin Solids Films, 268 (1995) 30-34.

[2] T.Tsuboi e P.W.M.Jacobs, J. Phys. Chem. Solids, 52 (1991) 69-80.

[3] R.M.F.Scalvi et al., XIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Águas de Lindóia, 2 a 6 de setembro de 1996.

## INFLUÊNCIA DO TRATAMENTO TÉRMICO NAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS E ÓPTICAS DE FILMES DE SULFETO DE CÁDMIO.

*João Guilherme Nogueira Matias<sup>1</sup>, José Francisco Julião<sup>2</sup> e Roberto de Toledo Assumpção<sup>3</sup>*

1 - Departamento de Física - UFC; 2 - Núcleo de Pesquisas Tecnológicas - UNIFOR

3 - DEMA-FEM-UNICAMP

*Palavras-Chave:* cds, filmes, eletrodeposição

Filmes semicondutores policristalinos tem sido bastante estudados ultimamente por apresentarem relação custo/benefício mais atraente que os seus similares monocristalinos. O sulfeto de cádmio, CdS, é um dos materiais mais pesquisados para aplicações em células fotovoltaicas de heterojunção, que é um dos nossos objetivos. Os filmes foram preparados por eletrodeposição galvanostática catódica, sobre substratos de Ti ou vidro condutor de ITO, os quais apresentaram estrutura policristalina com tamanho médio dos grãos entre 10 e 40 nm e diferentes estequiometrias. A caracterização dos filmes foi feita por espectroscopia fotoeletroquímica e C-V eletroquímico em diferentes soluções aquosas, permitindo que se determinasse o "band gap",  $E_g$ , o potencial de banda plana,  $V_{bp}$ , e a densidade efetiva de doadores,  $N_d$ . Das medidas de C-V efetuadas em filmes crescidos sobre ITO no intervalo de frequência entre 500 e 2000 Hz foi determinado um valor de  $V_{bp} \approx -1,18$  V vs ESC. Verificou-se uma dispersão mais acentuada para a frequência de 3 kHz, na qual  $V_{bp} = -1,28$  V, indicando a presença de estados de superfície.

Para as mesmas amostras verificou-se que  $N_d \cong 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>, enquanto que aquelas crescidos sobre Ti apresentaram um  $N_d \cong 10^{21}$  cm<sup>-3</sup>. Medidas de espectroscopia fotoeletroquímica mostraram que os filmes crescidos sobre Ti apresentam um "gap" direto e outro indireto com valores de energia dependendo da solução química usada nas medidas de caracterização. Nos filmes sobre Ti,  $N_d$  cresce com o tempo de tratamento térmico, a uma temperatura de 300 °C, entre 0 e 60 minutos, decrescendo daí em diante. Para mesma temperatura  $V_{bp}$  decresce com o tempo. Explicamos esse resultado como devido ao acréscimo na densidade de vacâncias de enxofre na rede cristalina. A variação destes parâmetros com a temperatura de tratamento térmico tem um comportamento semelhante ao anterior reforçando a explicação dada acima.

## PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES FINOS DE DIÓXIDO DE TITÂNIO.

*João Augusto Pereira Neto, Dorotéia de Fatima Bozano e Adão Antonio da Silva.*

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

*Palavras-chaves:* sol-gel, filmes finos, caracterização.

A conversão de energia solar em outros tipos de energia tal como a elétrica tem demonstrado ser uma das mais promissoras técnicas de obtenção de energia alternativa por causa da disponibilidade e eternidade da energia solar. Um dos caminhos para se efetuar esta conversão é a construção de células fotoelétricas economicamente viáveis. Estas células podem ser elaboradas por exemplo, através da deposição de filmes de materiais semicondutores (por exemplo TiO<sub>2</sub>) sobre substratos vítreos. O método sol-gel é uma das tecnologias mais apropriadas para a obtenção de filmes finos de óxidos, pois possibilita o controle da espessura, microestrutura e etc., de maneira simples e consideravelmente muito mais barata que as demais tecnologias (CVD, sputtering, etc). Filmes finos de óxido de titânio tem grande interesse para a fabricação de fotocélulas. Em nosso estudo apresentamos a obtenção de filmes finos de TiO<sub>2</sub> preparados a partir da deposição de uma suspensão coloidal de TiO<sub>2</sub> sobre substrato vítreo utilizando a técnica "dip-coating". Esta suspensão foi obtida a partir da hidrólise do Ti(OC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>)<sub>4</sub> em meio alcoólico ácido. Observa-se que a qualidade do filme obtido (transparência, aderência ao substrato e conversão de energia) depende criticamente do tamanho das partículas formadoras da suspensão coloidal. Neste trabalho apresentamos a influência dos parâmetros: concentração de água e controle da taxa de hidrólise sobre a qualidade do filme obtido. Já obtivemos um gel sem precipitação de TiO<sub>2</sub> e translúcido, isso tudo balanceando a quantidade de Ti(OC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>)<sub>4</sub>, álcool, ácido e água. Após tratamento térmico, o filme fino obtido foi transparente e também com resistência elétrica.

(CNPq/UFMS)

## REFLEXÃO TOTAL ATENUADA ANÔMALA

*Helena Libardi e Hans-Peter Grieneisen*

Instituto de Física - Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS

*E-mail:* HELENA@IF.UFRGS.BR

*Palavras-chave:* Reflexão anômala, Polarização S, Superfície

Medidas da refletividade em função do ângulo ou do comprimento de onda foram feitas para um sistema Prisma/Metal/Dielétrico em condição de reflexão interna total, utilizando-se luz com as polarizações P e S. De acordo com as equações de Fresnel, considerando meios lisos e homogêneos, apenas quando utilizarmos a polarização P observa-se uma atenuação da reflexão total (ATR), devido a excitação de modos de oscilação dos elétrons de superfície na interface metal/dielétrico (Plasmons-Polárítions de Superfície-SPP). Entretanto, irregularidades presentes em alguns filmes (rugosidades ou inhomogeneidades tipo ilhas ou grânulos) podem modificar as curvas de dispersão dos SPP e podem causar absorções anômalas. Um sinal de ATR anômala para a polarização S pode então ser observado. Foram utilizados filmes evaporados termicamente em substratos de BK-7 mantidos a temperatura ambiente (BK-7/Prata e BK-7/Prata/SiO). Observou-se para estes filmes ATR anômala com a polarização S e uma inibição do SPP para a polarização P, em contraste com medidas obtidas para filmes lisos e homogêneos, quando apenas o SPP é observado. A reflexão anômala observada apresenta uma forte dependência angular, em condição de reflexão interna total. Observa-se que o comprimento de onda para a máxima atenuação varia com o ângulo de incidência da luz. Os resultados são comparados com as previsões teóricas.

(Apoio Financeiro: FAPERGS, FINEP, CNPq, CAPES)

## MEDIDAS ABSOLUTAS DE ADESÃO DE FILMES FINOS METÁLICOS

*R. W. W. Riedtmann, N. P. Matoso, W. H. Schreiner, D. H. Mosca*

Laboratório de Materiais, Departamento de Física - UFPR

81531-990 Curitiba Paraná

*S. R. Teixeira*

Laboratório de Filmes Finos, Instituto de Física - UFRGS

81501-970 Porto Alegre RS

*palavras-chave:* adesão, filmes finos, crescimento epitaxial

O princípio de funcionamento do adesômetro construído baseia-se na aplicação de uma rampa de potencial elétrico sobre um capacitor de placas paralelas até o descolamento do filme fino metálico, fixado sobre uma delas. No sistema capacitivo montado, uma das placas é imóvel e constituída por um bloco de teflon em cuja superfície plana é fixado mecanicamente um filme fino metálico depositado sobre qualquer tipo de substrato. A outra placa do capacitor é móvel, estando mecanicamente fixada sobre o eixo de translação de um micrômetro de precisão. A distância entre as placas do capacitor é mantida entre 1 e 5 micrometros em ambiente de  $10^{-7}$  Torr no interior de uma câmara de altovácuo. O alinhamento das placas do capacitor é obtido pela maximização da capacitância utilizando uma ponte capacitiva comercial. O potencial elétrico é aplicado através de uma fonte de alta tensão ( de 0 a 6 kV dc) com sistema de proteção e detecção eletrônica rápida de curto-circuito. A medida da adesão A em valores absolutos de filmes metálicos sobre os substratos é obtida através da expressão:  $A = \sqrt{2} / \epsilon_0 d^2$ , sendo V o potencial elétrico máximo aplicado até o descolamento do filme fino e a detecção de uma corrente elétrica e d é a separação das placas do capacitor. A construção e o funcionamento do adesômetro capacitivo é descrita neste trabalho. Como aplicação é mostrado medidas de adesão de filmes finos de cobre epitaxialmente crescidos diretamente sobre substratos de silício e sobre filmes finos de fluorita monocristalinos, previamente depositados sobre substratos de Si. Em ambas situações as superfícies possuem orientação  $\langle 111 \rangle$ .

(CNPq, FUNPAR, PADCT)

## STRUCTURAL AND OPTICAL PROPERTIES OF a-C:H:F FILMS PRODUCED BY PECVD

*E.C. Rangel\**, *S.F. Durrant\**, *S.G. Castro\*\**, *GG. Kleiman\*\**,  
*R. Landers\*\** and *M.A. Bica de Moraes\**,

Laboratório de Processos de Plasma\*-Grupo de Física de Superfícies\*\*  
DFA-IFGW-UNICAMP, 13083-970, Campinas, SP

*Key words:* PECVD, fluorinated carbon films

Plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD) as a method for the production of thin films suited to a range of technological applications, such as protective coatings, electronic components, and permselective membranes, is well established [1]. Fluorinated hydrogenated carbon films produced by this method have also received some considerable research attention because of their interesting optical properties and low coefficients of friction [2]. In this work, thin films were deposited in a vacuum system fitted with water-cooled parallel-plate electrodes. The upper electrode was fed radiofrequency power (40 MHz, 70 W) through a matching box and in-line Watt meter. From mixtures of trifluorotoluene and tetrafluoromethane, at different proportions of the latter, fluorinated carbon films were deposited. Structural properties of the films were examined by transmission infrared spectroscopy (IRS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), revealing the presence of CH, CF, CF<sub>2</sub> and CF<sub>3</sub> groups. As revealed by XPS, the degree of fluorination of the films increased with increasing proportions of CF<sub>4</sub> in the chamber feed. R<sub>F</sub>. The most fluorinated of the films resembled teflon. Optical parameters, such as the optical gap, E<sub>04</sub>, were determined from transmission ultraviolet-visible spectra. The degree of fluorination and E<sub>04</sub> were both controllable by a suitable choice of R<sub>F</sub>.

[1] H. Yasuda, *Plasma Polymerization*, Academic Press, New York, 1985.

[2] S.F. Durrant, R.P. Mota and M.A. Bica de Moraes, *J. Appl. Phys.*, 71, 448 (1992).

(CNPq)

## SISTEMA PARA MEDIDAS ELETROQUÍMICAS EM FILMES FINOS

*Marcelo Andrade Macêdo e Délio Costa Cavalcanti*

Departamento de Física - CCET

Universidade Federal de Sergipe

49.100-000 - São Cristóvão - SE

*Palavras-Chave:* aquisição, eletroquímica, filme fino

Montou-se um sistema para medidas eletroquímicas em filmes finos composto de três módulos interligados entre si. O primeiro módulo é um microcomputador PC 486 DX2-66 com 12 Mbytes de memória RAM, o segundo módulo é uma estação de aquisição de dados da HP com um voltímetro de resolução de 10  $\mu$ V em voltagem DC com potencial máximo de 3 V e 1 mV em voltagem AC com potencial máximo de 2 V e uma interface D/A de resolução de 2,5 mV (12 bits) em voltagem DC e 2,5  $\mu$ A (13 bits) em corrente DC e o terceiro módulo, montado neste laboratório, é uma ponte eletroquímica que permite a ligação entre a cela eletroquímica e a estação de aquisição de dados. A cela eletroquímica é composta de três eletrodos: amostra a ser analisada, uma referência e um eletrodo para aplicar a tensão ou corrente na amostra. Neste sistema é possível realizar medidas de voltametria cíclica, pulsos potenciostáticos e titulação galvanostática intermitente. Elaborou-se um programa computacional em Visual Basic no ambiente Windows, o qual possibilita uma agradável interface entre o usuário e o experimento. Este programa controla a estação de aquisição de dados, enviando e recebendo dados referentes ao experimento que está sendo realizado. Medidas de voltametria cíclica foram realizadas no filme fino de CeO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> (obtido via processo sol-gel "dip-coating") em KOH-0,1 M. Foi aplicada uma varredura de potencial e medida a corrente de resposta da amostra. Os resultados não são conclusivos, mas indicam uma boa funcionalidade do sistema. Estão sendo efetuados ajustes no programa computacional e na ponte eletroquímica visando a otimização do sistema.

## FOTOCONDUTIVIDADE EM GERMÂNIO AMORFO HIDROGENADO DOPADO COM GÁLIO

*Françoise Toledo Reis, David Comedi e Ivan Chambouleyron*  
Laboratório de Conversão Fotovoltaica, DFA, IFGW, UNICAMP

**Palavras-Chave:** fotocondutividade, semicondutores amorfos, a-Ge:H

Os semicondutores amorfos, especialmente o silício amorfo hidrogenado(a-Si:H), têm sido atenciosamente estudados enquanto materiais optoeletrônicos, pois tendem a apresentar alta fotosensitividade. Em particular, a busca de um semicondutor com banda de energia proibida pequena, para aplicações tais como células solares de multicamadas tipo TANDEM, levou a um interesse crescente no germânio amorfo hidrogenado(a-Ge:H). Para a otimização desse material é essencial compreender os mecanismos de transporte eletrônico e o processo de recombinação dos foto-portadores. Neste trabalho estudamos a fotocondutividade em filmes finos de a-Ge:H dopados com gálio (elemento dopante do tipo p). As amostras foram crescidas por *RF-sputtering* utilizando fontes sólidas de Ga e Ge com concentrações atômicas relativas de Ga entre  $10^{-5}$  e  $10^{-2}$ . Realizamos medidas da fotocondutividade espectral dos citados filmes, bem como da fotocorrente em função da intensidade da luz incidente. Paralelamente, observamos o comportamento do produto mobilidade-tempo de vida dos portadores ( $\mu\tau$ ) com a variação da concentração de dopantes nas amostras e a posição do nível de Fermi ( $E_F$ ). Acharmos que este produto inicialmente decresce com o aumento na concentração de dopante, até um valor mínimo cerca de dez vezes menor que o valor obtido para a amostra intrínseca. A análise mostra que este mínimo acontece para os filmes nos quais  $E_F$  atinge o meio da banda de energia proibida. Para maiores concentrações de Ga, os valores de  $\mu\tau$  apresentam um crescimento significativo, seguido de um novo decréscimo na região de alta concentração de dopantes. Para explicar os resultados obtidos, recorreremos a um modelo simples baseado nas mudanças da densidade relativa de defeitos carregados eletricamente, induzidas pelo deslocamento do nível de Fermi no material dopado. Através deste modelo podemos entender o papel de  $E_F$  e a densidade de defeitos na determinação da fotocondutividade e do produto  $\mu\tau$  em a-Ge:H.

(CNPq)

## PRODUÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES DE ESTANHO DOPADOS COM ÍNDIO

*Cledemar Pereira Machado, Dorotéia Fatima Bozano e Adão Antonio da Silva.*  
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul

**Palavras-chaves:** sol-gel, filmes finos, caracterização.

Certamente os aspectos tecnológicos mais importantes do processo sol-gel é a gelificação, o fluido sol ou solução é ideal para a preparação de filmes finos por processos tais como "dip-coating" (imersão do substrato na solução), "spin-coating" (espalhamento da solução sobre o substrato por rotação do mesmo), ou "spray" (borrifamento da solução no substrato). Os filmes obtidos pelo processo sol-gel quando comparados àqueles obtidos por processos convencionais tais como: CVD, evaporação ou sputter requerem muito menos equipamentos, e sua produção é consideravelmente mais barata. Também, permite-nos ter um controle preciso da microestrutura, do volume, tamanho dos poros e área superficial do filme. Nosso método de obtenção dos filmes finos a base de óxido de estanho ou óxido de índio, a partir do processo sol-gel, utiliza como precursores os alcóxidos correspondentes. A composição dos filmes estudados neste trabalho é a base de óxidos a partir dos alcóxidos de estanho e índio. Em razão destes alcóxidos serem de altíssimo custo, materiais importados e altamente higroscópicos podendo se hidrolisar no transporte, preparamos os respectivos alcóxidos em nosso laboratório dissolvendo os cloretos  $In_2Cl_3 \cdot 4H_2O$  e  $SnCl_2$  em etanol absoluto respectivamente. Estas soluções foram refluxadas por um período de uma hora e colocadas para descansar por cinco dias em tubos de ensaio abertos em temperatura ambiente. Os objetivos destes procedimentos são: elevar a viscosidade das soluções através da hidrólise com a umidade ambiente e da evaporação do solvente. Os filmes obtidos são transparentes e apresentam resistência elétrica de  $200K\Omega$ .

(CNPq/CECITEC/UFMS)

## OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE FILMES CONDUTORES TRANSPARENTES

*Ana C. Arias, Yogendra P. Yadava, Lucimara S. Roman e Ivo A. Hümmelgen*  
Universidade Federal do Paraná

*Palavras-Chave:* Óxido de Estanho, TO, filmes condutores transparentes

Neste trabalho é apresentado um sistema desenvolvido para a fabricação de filmes de óxido de estanho (TO = "Tin Oxide"), que são simultaneamente transparentes à luz visível e condutores de eletricidade. Estes filmes são obtidos por CVD (CVD- "Chemical Vapour Deposition"= Deposição por Vapor Químico), através da evaporação direta de  $\text{SnCl}_2$  (cloreto estanhoso). Estão sendo produzidos e caracterizados filmes de óxido de estanho em diferentes temperaturas de deposição. Foram feitas medidas de resistência elétrica pelo método das quatro pontas, utilizando contatos de alumínio evaporados sobre o filme de óxido de estanho, constatou-se que filmes preparados a  $400^\circ\text{C}$  possuem uma alta resistência elétrica, da ordem de  $10\text{k}\Omega$ , enquanto que os filmes preparados a temperaturas superiores a  $500^\circ\text{C}$  apresentam valores muito mais baixos de resistência, da ordem de  $100\Omega$ . Utilizando microscopia eletrônica de varredura verificou-se, que filmes preparados a diferentes temperaturas de substrato, apresentam diferentes formas de cristalização quanto ao tamanho e densidade de microcristais, sendo que filmes preparados a temperaturas superiores a  $500^\circ\text{C}$  apresentam formação de estruturas dendríticas. Através de análise estrutural dos filmes, por difratometria de raio-X, verificou-se que filmes depositados a temperaturas inferiores a  $500^\circ\text{C}$  apresentam uma fase amorfa, enquanto que filmes preparados a temperaturas maiores que  $500^\circ\text{C}$  apresentam uma estrutura bem definida de  $\text{SnO}_2$ . Já nas amostras preparadas a  $600^\circ\text{C}$  não ocorre a fase amorfa, mas há a formação de uma estrutura cristalina de  $\text{Sn}_3\text{O}_4$ . A qualidade ótica dos filmes de TO foi investigada por espectroscopia de luz visível. Os filmes que apresentam melhor transmitância são os depositados a temperaturas superiores a  $500^\circ\text{C}$ . A caracterização destes filmes, demonstra que os mesmos podem ser utilizados na fabricação de dispositivos optoeletrônicos, uma vez que possuem alta transmitância ótica e boa condutividade elétrica.  
(PADCT : CNPq : CAPES)

## DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS DE OXINITRETO DE SILÍCIO POR PECVD

*Carlos A. Sasaki, Fernando J. Fonseca, Ely A. T. Dirani e Adnei M. de Andrade*  
Laboratório de Microeletrônica - Departamento de Engenharia Eletrônica  
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo  
e-mail: csasaki@lme.poli.usp.br

*Palavras Chave:* oxinitreto, filme finos, pecvd

Recentemente tem crescido o interesse nos filmes finos isolantes depositados sobre substratos a baixas temperaturas (abaixo de  $400^\circ\text{C}$ ). Filmes finos de oxinitreto de silício são materiais importantes nas tecnologias de isolamento para a fabricação de circuitos com tecnologia VLSI (Very Large Scale Integrated). Outras utilizações são em aplicações como em células solares como camada antirefletora, dielétricos em dispositivos tipo túnel e em transistores de filme fino. As películas de oxinitreto de silício estudadas foram preparadas por um sistema de deposição por fase de vapor assistido por plasma de rádio frequência (rf) a  $13,56\text{MHz}$  (PECVD) a temperaturas que variaram de  $200^\circ\text{C}$  a  $400^\circ\text{C}$  e mistura gasosa de silano ( $\text{SiH}_4$ ), óxido nítrico ( $\text{N}_2\text{O}$ ) e hidrogênio ( $\text{H}_2$ ). A influência das condições de deposição foram verificadas levando em consideração: temperatura do substrato, composição da mistura dos gases, potência de rf e pressão de deposição. Os resultados das análises de espectroscopia de infravermelho têm revelado a presença de ligações tipo Si-N, N-H e Si-O. As intensidades de absorção são maiores para as ligações Si-N em relação as ligações tipo N-H, indicando boa possibilidade de estequiometria para filmes de oxinitretos de silício amorfo. Observou-se também que a ausência de hidrogênio beneficia as ligações tipo Si-O. O índice de refração das amostras foi medido pela técnica de elipsometria e revelou um comportamento linear com relação a concentração de óxido nítrico.

## DESENVOLVIMENTO DE DOIS MODELOS DE TEMPERATURA PARA A OXIDAÇÃO INDUZIDA A LASER EM SUPERFÍCIES METÁLICAS

*J.L. Jiménez Pérez, A. Cruz-Orea, I. Doi*

Faculdade de Engenharia Elétrica-FEE Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP  
13081-970 Campinas-SP, Brasil

*Palavras-Chave:* litografia, gravação a laser, filmes finos

Desenvolvemos dois modelos, um modelo aproximado (analítico) e outro exato (numérico) para estudos da oxidação de filmes metálicos de Titânio ( $\approx 1000$  angströms) suportados em substratos de vidro, expostos a irradiação com pulsos de um laser de Nd:YAG (duração dos pulsos  $\tau = 290$  ns, frequência de repetição  $f = 200$  Hz e intensidades variando de 3,17 a 2,40 MW/cm<sup>2</sup>). A amostra, 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 microtopográfico das trilhas revela relêvos associados ao crescimento de filmes finos ( $\approx 900$  a 4000 angströms). Os filmes foram identificados como sendo formados por TiO<sub>2</sub> e resultam de reações de termo-oxidação a laser do Titânio em presença de O<sub>2</sub> (ar). Admitindo um modelo parabólico para a taxa de reação conseguimos obter uma expressão analítica 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. O algoritmo numérico exato, para a realização dos cálculos envolvido na implementação do modelo, leva em conta a necessidade de uma formulação auto-consistente, uma vez que os parâmetros (ópticos e térmicos) reguladores do aquecimento do sólido sofrem, eles mesmos, os efeitos da elevação de temperatura que determinam, produzindo-se, assim, um processo retro-alimentivo que torna o correspondente problema matemático altamente não linear. As curvas teóricas assim obtidas são comparadas com as medidas experimentais, revelando-se uma excelente concordância.

## THIN FILMS THICKNESS: A COMPARISON BETWEEN EXPERIMENTAL RESULTS FROM EPMA ANALYSIS AND MONTE CARLO SIMULATION

*C.S. Campos<sup>1</sup>, M.R.F. Soares<sup>2</sup>, E. Acosta<sup>3</sup>, E. Coleoni<sup>3</sup>, and M.A.Z. Vasconcellos<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

<sup>2</sup>Instituto de Geologia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

<sup>3</sup>Univesidade de Córdoba, Argentina

*Palavras-Chave:* thin film, electron probe microanalysis, monte carlo simulation

Electron probe microanalysis (EPMA) offers singular characteristics for analysis of thin films such as lateral resolution, around 1  $\mu\text{m}$ , and depth sensitivity of a few atomic monolayers. Determination of film thickness and composition relies on an adequate description of the depth distribution function  $\phi(\rho z)$ . This function describes the depth distribution of the generated X-ray photons in a sample irradiated by an electron beam. This function is well known for bulk materials but not for thin film systems where the effects of different combinations of film/substrate atomic numbers, film thicknesses, electron accelerating voltages and measured x-ray line energies carefully assessed, on the distribution function remain to be determined. If sufficient data is accumulated it should be possible to predict quantitatively how the x-ray distribution in the film is modified from that in the bulk material for any set of experimental conditions and hence, develop a correction procedure suitable for dealing with thin films. In order to assess this information, different metal films (Mo,Cu,Cr,Nb,Ti) with nominal thicknesses ranging from 50 to 500 nm were deposited over a Si (111) substrate. The X-ray intensity for each set of films was measured as a function of the electron accelerating voltage. Intensities for pure bulk elements were measured in the same experimental conditions to study correction procedures for thin film analysis.

In order to investigate the characteristics of depth distribution functions  $\phi(\rho z)$ , for bulk samples and different combinations of film/substrate were also obtained by Monte Carlo simulation. The package PENELOPE has been used for this purpose since it has shown to give a reliable description of electron transport in the considered energy range. Using the simulated  $\phi(\rho z)$  functions, X-ray intensities were calculated and compared with the experimental values.

## DEPOSIÇÃO ELETROLÍTICA E QUÍMICA DE Cu SOBRE Si

*Luiz F. O. Martins<sup>†</sup>, André A. Pasa<sup>†</sup>, Claus M. Hasenack<sup>†</sup>, Sebastião G. dos Santos Filho<sup>†</sup>,  
Paulo C. T. D' Ajello<sup>†</sup>, Wolfgang H. P. Losch<sup>‡</sup>, Márcio A. Fiori<sup>†</sup> e Emerson M. Boldo<sup>†</sup>*

<sup>†</sup>LabFES/LEC/LabMat - Departamento de Física - CFM - UFSC

<sup>‡</sup>LSI/PEE/USP - São Paulo <sup>§</sup>LEMI/PEMM/COPPE - UFRJ

*Palavras-Chave:* eletrodeposição, filmes finos, semicondutores

Neste trabalho, a deposição de cobre sobre silício monocristalino, seja por processo eletroquímico ou químico ('*electroless*'), foi investigada. Foram usadas soluções aquosas com concentrações conhecidas de íons de cobre, com ou sem a adição de ácido fluorídrico ou de ácido sulfúrico.

Para a obtenção dos filmes por eletrodeposição, usou-se o arranjo usual de célula eletroquímica com três eletrodos acoplados a um potenciostato. Já para a obtenção por deposição química (realizada com ou sem agitação da solução) utilizou-se um cuba de TEFLON que continha apenas o substrato de silício, o mecanismo para agitação e a solução a ser usada para a deposição. Os depósitos foram caracterizados e analisados pelas técnicas de microscopia eletrônica de varredura (SEM), espectroscopia Auger (AES), espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS) e perfilometria.

A deposição eletrolítica sob regime catódico revelou uma estrutura granular não-homogênea, independentemente da adição de ácido fluorídrico ou ácido sulfúrico ao eletrólito. Sob regime anódico, uma corrente elétrica significativa com concomitante deposição de cobre foi detectada, mas somente se HF havia sido adicionado à solução. Neste caso, os depósitos de Cu exibiram boa adesão, uma aparência metálica e uma estrutura granular e compacta com tamanho de grão da ordem de 500nm. Os espectros Auger de várias amostras revelaram um filme bastante puro com apenas uma pequena quantidade de oxigênio na interface do filme com o substrato. Em contraste, para a deposição química, grãos de cerca de 100nm foram observados.

Para os dois últimos processos de deposição citados - eletroquímico em regime anódico ou químico - há indícios para se supor o processo de deposição de cobre estar diretamente vinculado com a corrosão do substrato de silício.

(CNPq/CAPES)

## CARACTERIZAÇÃO FÍSICA DE AMOSTRAS COM ESTRUTURAS ESTRATIFICADAS OBTIDAS VIA PROCESSAMENTO A LASERNO IV

*Daniel de Miranda Silveira e Carlos Alberto da Silva Lima*

Instituto de Física Gleb Wataghin  
Departamento de Eletrônica Quântica  
Universidade Estadual de Campinas

*Palavras-Chave:* conversão fototérmica, ondas térmicas, filmes multicamadas

A conversão fototérmica (CFT) é uma poderosa técnica de investigação de materiais e vem sendo largamente utilizada tanto a nível de pesquisa básica quanto em aplicações industriais. Numa primeira etapa, estudamos em profundidade a CFT, assim como suas diversas aplicações (espectroscopia fototérmica, microscopia fototérmica, investigação de organismos *in vivo*, etc.). A técnica baseia-se na geração e detecção de ondas térmicas, através da exposição de amostras a um feixe de laser modulado numa câmara hermeticamente fechada. Nesse trabalho, utilizamos a CFT (combinada com detecção acústica) para a caracterização de filmes depositados sobre substratos metálicos (filmes multicamadas). Após vasta pesquisa bibliográfica, tivemos contato com os equipamentos do laboratório e passamos ao projeto e construção de uma câmara especial para as medidas. Dentre os materiais estudados estão filmes finos de óxidos metálicos suportados, depositados através da técnica de termo-oxidação a laser de substratos metálicos (exposição do substrato a um feixe de laser ao ar livre, resultando na criação de um filme de óxido sobre o substrato). Estudando e analisando as variações de amplitude e/ou fase do sinal fototérmico com a frequência de modulação obtem-se perfis de profundidade para as amostras, que revelam informações importantes sobre as características ópticas e térmicas das diferentes camadas da amostra.

(CNPq)

## OPTOSPINOGRAFIA DE FILMES DE SILICA POR SOL-GEL

*Alessandro Bacchieri e Flavio Horowitz*

Instituto de Física, UFRGS - Campus do Vale, CP 15051  
91501-970 Porto Alegre, RS - e-mail: [bacchieri@if.ufrgs.br](mailto:bacchieri@if.ufrgs.br)

**Palavras-Chave:** monitoramento óptico, filmes sol-gel, spin coating

Embora a técnica de *spin coating*, usada amplamente pela indústria de semicondutores, seja conhecida há várias décadas, o desconhecimento da evolução dos parâmetros experimentais durante o processo foi considerado, até recentemente, como o maior entrave ao conhecimento da física envolvida. Nesta direção, estamos desenvolvendo a "optospinografia", ie monitoramento interferométrico *in situ* do método de *spin coating* em tempo real. Para o arranjo experimental necessário, contruímos um *spinner* com sistema óptico duplo-feixe a laser, especialmente projetado para monitorar a espessura óptica de filmes em tempo real, a 1000-3000 rpm. Com este equipamento, interfaceado a um microcomputador com coleta de dados em intervalos de até 1 ms, foi possível obter curvas de reflectância modulada *versus* tempo (spinogramas), que permitem uma análise dos quatro principais estágios de evolução do filme: I- Oscilações pré-*spinning* no líquido, II- Fluxo de massa ultra-rápido, III- Evaporação por convecção e IV- Evaporação residual. O sol utilizado neste trabalho consiste de uma solução 1:1 em volume de TEOS (tetra-etil ortossilicato) e HCl 0,1 M, para produzir filmes de SiO<sub>2</sub> após tratamento térmico. Os resultados indicam que a técnica de optospinografia tem se mostrado capaz de evidenciar as principais características da dinâmica temporal do processo, o que deverá levar a progressos quanto ao grau de controle na produção de recobrimentos por *spin coating* para aplicações específicas.

(CNPq, FINEP)

## Estudo Comparativo de Métodos de Medida de Rugosidade Usando Speckle

*J.A.Ribeiro, Mikiya Muramatsu e Akiyoshi Mizukami*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo  
\*Faculdade de Tecnologia de São Paulo

**Palavras-chave:** rugosidade, superfícies, speckle.

É apresentado um estudo comparativo de métodos de medida da rugosidade a partir dos padrões de speckle refletidos por amostras metálicas e de vidro com rugosidades conhecidas. Os métodos usados são os de correlação de speckle e de contraste de speckle. No primeiro calcula-se a correlação entre sucessivas imagens do campo de speckle refletido pela amostra rugosa, sendo que a curva obtida dá uma medida da rugosidade. No método de contraste de speckle determina-se o contraste do campo de speckle e, a partir daí calcula-se a rugosidade. Neste trabalho realizamos uma análise comparativa dos métodos acima, utilizando amostras de rugosidade conhecida, medida por meio de rugosímetro mecânico. O aparato experimental compreende, além de um laser, uma câmara CCD e um goniômetro. A amostra e a câmara podem ser giradas com precisão angular determinada pelo círculo graduado do goniômetro. As imagens do campo de speckle são digitalizadas por uma placa "frame-grabber" e processadas usando diversos softwares desenvolvidos em nosso laboratório. O estudo mostra que, em 0,632 μm, a medida de contraste de speckle fornece resultados confiáveis para valores de R<sub>a</sub> menores que 0,1 μm. Já para a correlação de speckle o resultados são confiáveis para R<sub>a</sub> maior que 1,0 μm. A faixa de medida de rugosidade pode ser estendida utilizando-se outros comprimentos de onda de iluminação. Discute-se a influência de fatores como a polarização da radiação incidente, sua coerência temporal, a área iluminada na amostra, e o processo de preparação da superfície. Descreve-se ainda o conceito de um instrumento para medida de rugosidade baseado nos dois métodos estudados. O trabalho mostra que o fenômeno de speckle pode ser a base de novas técnicas e instrumentos para medida de rugosidade.

(trabalho realizado com o apoio do CNPq/PADCT/RHAE)

## PECVD OF TITANIUM ETHOXIDE/OXYGEN/HELIUM MIXTURES

*N.C. da Cruz, S.F. Durrant, and M.A. Bica de Moraes,*

Laboratório de Processos de Plasma-DFA-IFGW-UNICAMP  
13083-970, Campinas, SP

**Key words:** PECVD, TiO<sub>x</sub>-like films

Owing to their chemical stability and high refractive indexes, titanium oxide films find application as anti-corrosion barriers and in optics. A novel way of producing titanium oxide-like films is by the plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD) of a mixture of a titanium compound, oxygen and an inert gas. In this work, titanium ethoxide (TEOT), Ti(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O)<sub>4</sub>, was chosen as a monomer for the production of titanium oxide-like films by PECVD. Use of this compound, however, required some modification of the standard sample introduction apparatus to our deposition chamber [1]. An air-tight container was required to house the TEOT, which is a liquid at room temperature. To form a vapour of TEOT, heating of the liquid to about 115 °C was required. A special substrate holder was also mounted between the horizontal parallel-plate electrodes in the chamber. The holder could be cooled or heated, and a variable negative bias, V<sub>b</sub>, could also be applied. Films were deposited from TEOT/oxygen/helium mixtures, the key system variable being the proportion of oxygen in the feed, R<sub>ox</sub>, whose influence on the plasma concentrations of species such as H, CH, O and CO was studied by actinometric optical emission spectrometry. Structural properties of the films were investigated using transmission infrared spectrophotometry, revealing the presence of CH, OH and C=O groups. Ultraviolet-visible spectroscopy was used to determine the dependence of the optical gap of the films on R<sub>ox</sub>.

[1] S.F. Durrant, N. Marçal, S.G. Castro, R.C.G. Vinhas, M.A. Bica de Moraes and J.H. Nicola, *Thin Solid Films*, 259, 139 (1995).

(CNPq)

## ESTUDIO DE VIBRACIONES DE CAPAS FINAS MEDIANTE VARIACIONES DE FASE LUMINOSA

*Ismael Núñez, Carlos Negreira, José Ferrari\**

Instituto de Física - Facultad de Ciencias - Uruguay

\*Instituto de Física - Facultad de Ingeniería - Uruguay

**Palabras claves:** capas finas, objetos de fase (óptica), método del dark-ground (óptica).

La utilización de capas finas en la fabricación de componentes electrónicos (semiconductores, piezo-eléctricos y superconductores) está en pleno desarrollo. El comportamiento dinámico de dichas capas bajo excitaciones mecánicas requiere métodos capaces de medir desplazamientos del orden de Angströms, para lo cual los métodos ópticos son particularmente útiles. La luz reflejada por una superficie en vibración resulta modulada en fase proporcionalmente a los desplazamientos de la superficie. Entre los métodos ópticos, los interferométricos son relativamente costosos y requieren gran cantidad de tiempo para la adquisición de datos, puesto que se necesita hacer un relevamiento punto por punto de la superficie vibrante. En el presente trabajo, el método del campo oscuro (*dark-ground*) para visualización de objetos de fase, ha sido utilizado para obtener el campo de amplitudes de vibración de una capa fina. Con este método, se obtiene una imagen de toda la superficie de interés en unos pocos minutos. Además el método permite la utilización de sencillos sistemas óptico para magnificar la imagen, obteniéndose resoluciones laterales de algunas micras.

## PRODUCTION OF a-C:Si:H:F FILMS BY PECVD

S.F. Durrant, S.G. Castro\* and M.A. Bica de Moraes,

Laboratório de Processos de Plasma-Grupo de Física de Superfícies\*-DFA-IFGW-UNICAMP  
13083-970, Campinas, SP

**Key words:** PECVD, IRS, XPS

Use of plasma enhanced chemical vapour deposition (PECVD) is well known for the production of amorphous hydrogenated carbon films. Additional elements, such as oxygen, nitrogen or fluorine, may also be incorporated into the deposited material by the inclusion of a suitable inorganic gas in the plasma feed. We have investigated the properties of a-C:H:N [1], a-C:H:O [2] and a-C:H:F [3] films deposited onto substrates placed on the lower electrode of a set of horizontal parallel plates within a vacuum chamber. The upper electrode is fed power (40 MHz, 100 W maximum) and the lower earthed. These researches are here extended to a-C:Si:H:F films deposited from tetramethylsilane (TMS)/sulfur hexafluoride (SF<sub>6</sub>) mixtures. Structural properties of the films, deposited at various proportions of SF<sub>6</sub> in the feed, R<sub>s</sub>, are probed by transmission infrared spectroscopy (IRS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). The optical parameters refractive index, n, absorption coefficient, α, and optical gap, E<sub>04</sub>, of the films are determined from ultraviolet-visible spectral data. The degree of fluorination of the films is found to be controllable by the choice of R<sub>s</sub>. A mechanism depending on the density of π and σ bonds is suggested to be responsible for the dependence of E<sub>04</sub> on R<sub>s</sub>.

[1] S.F. Durrant, N. Marçal, S.G. Castro, R.C.G. Vinhas, M.A. Bica de Moraes and J.H. Nicola, *Thin Solid Films*, 259, 139 (1995).

[2] S.F. Durrant, S.G. Castro, J.I. Cisneros, N.C. da Cruz and M.A. Bica de Moraes, *J. Vac. Sci. Technol. A*, in press (1996)

[3] S.F. Durrant, R.P. Mota and M.A. Bica de Moraes, *Thin Solid Films*, 220, 295 (1992).

(CNPq)

## DISTRIBUIÇÃO DE POROS EM a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>:H OBTIDO POR PECVD

R.J. Prado<sup>1</sup>, D.R.S. Bittencourt<sup>1</sup>, M.H. Tabacniks<sup>1</sup>, M.C.A. Fantini<sup>1</sup>, M.P. Carreño<sup>2</sup>, I. Pereyra<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, USP, DFA, CP 66318, 05389-970, São Paulo, SP

<sup>2</sup>Escola Politécnica, USP, LME, CP 8174, 05508-970, São Paulo, SP

**Palavras-Chave:** carbeto de silício amorfo hidrogenado, PECVD, SAXS.

Filmes finos a base de silício amorfo hidrogenado e suas ligas são utilizados em diversos dispositivos eletrônicos. Neste trabalho foram estudadas as propriedades ópticas, químicas e morfológicas de filmes finos de carbeto de silício amorfo hidrogenado (a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>:H), crescidos Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) em condições diferentes de fluxo de silano (4 e 20 sccm) e concentração de metano (40, 80 e 90%). Medidas espectrofotométricas foram utilizadas para a determinação do "gap óptico". A concentração x de átomos de carbono foi determinada por Rutherford Back-Scattering (RBS). O espectro vibracional das amostras foi obtido por espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), de onde foram retiradas as informações de caráter composicional e indicações sobre as ligações químicas. O estudo morfológico dos filmes, depositados sobre Kapton, foi efetuado por espalhamento de raios-X a baixo-ângulo (SAXS). Os filmes foram caracterizados em duas fontes diferentes de luz: a) tubo de cobre convencional (λ = 1,5418 Å), no IFUSP, e b) luz síncrotron (λ = 1,3778 Å), no LURE (Orsay - França). Os resultados obtidos com ambas as fontes de luz foram comparados com base na relação sinal/ruído e tempo de medida. Para ambas as medidas analisou-se a distribuição de tamanho de partículas, usando um modelo de poros esféricos do programa GNOM, bem como a densidade relativa de microporos nas amostras. Os resultados obtidos com ambas as fontes de luz são consistentes: o aumento da concentração de CH<sub>4</sub> implica no aumento do tamanho dos poros, entre 20 Å e 80 Å, e no aparecimento de poros maiores, entre 100 Å e 300 Å. Para todas as amostras a densidade de poros menores é dominante na distribuição de tamanhos. A densidade relativa de microporos aumenta para filmes crescidos fora do regime de "starving" plasma, característico de deposições a baixo fluxo de SiH<sub>4</sub>, com alta concentração de CH<sub>4</sub> e baixa potência de rf.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## FILMES FINOS DE $\text{PbZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$ (PZT) OBTIDOS POR MÉTODO QUÍMICO

*Eudes Borges de Araújo e José Antônio Eiras*  
Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos

**Palavras-Chave:** filmes, finos, ferroelétricos

Nos últimos anos o interesse por filmes finos de materiais ferroelétricos cresceu bastante em virtude do potencial que estes apresentam no âmbito tecnológico, destacando-se como uma linha de pesquisa atraente, principalmente pelas propriedades exibidas, dentre as quais os efeitos piezoelétricos, piroelétricos e eletro-ópticos. Dos materiais que despertaram no estudo de filmes finos ferroelétricos, o PZT,  $\text{PbZr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}_3$  (titanato zirconato de chumbo), reúne um grande número de propriedades de interesse que podem ser ampliadas com dopagens tais como La e Nb. Métodos pioneiros para a obtenção de filmes finos foram centrados em técnicas de evaporação. Hoje, porém, destacam-se o *sputtering* e o *CVD* de tal forma que os filmes obtidos por essas técnicas apresentam os melhores resultados. As vantagens desses métodos vão de alto percentual de deposição ao controle da estequiometria. O trabalho aqui apresentado consiste em adequar um método químico alternativo que apresente vantagens em relação aos similares no que diz respeito ao processo de fabricação e seja capaz de produzir filmes finos de qualidade comparável aos métodos já estabelecidos. Para tanto, filmes de PZT 60:40 foram preparados com o objetivo de mostrar a viabilidade do método que envolve mistura de óxidos e posterior ataque químico com solução a 10% de ácido nítrico ( $\text{HNO}_3$ ). Os filmes obtidos apresentam espessura média de  $1\mu\text{m}$  por camada depositada em substrato de quartzo. A cinética de cristalização é analisada por DTA e difração de raios-x que indica a presença da fase perovskita para tratamentos térmicos acima de  $450^\circ\text{C}$  por 1 hora. Os resultados, quanto ao aspecto dos filmes, são analisados por meio de micrografias e mostram que filmes espessos, acima de  $4\mu\text{m}$ , estão propensos a trincas durante o tratamento térmico.

(Trabalho financiado pelo CNPq)

## FILM AND SURFACE OPTICAL ANISOTROPY DETERMINATION BY THE POLARIZATION REFLECTOMETRY METHODS

*G.I. Surdutovich, R.Z. Vitlina, S. Durrant, V. Baranauskas*

Depto de Semicondutores e Fotônica, FEE, UNICAMP, 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

*A.V. Ghiner*

Universidade Federal do Ceará, 60450-970 - Fortaleza - Ce - Brasil

**Palavras-Chave:** surface, anisotropy, reflectometry

Three novel methods for the determination of optical anisotropy are proposed and tested on porous silicon (PS) films, crystalline silicon, calcite and  $\text{aSi:H-SiC:H}$  multilayer structure. The first method is based on the measurement of s- and p- polarized light reflectances near normal, grazing and Brewster angles and may be applied to any uniaxial medium or sufficiently thick film in the case of not so strong scattering. It was tested on high quality Si sample and thick PS films. For thin films with thicknesses of few wavelengths a new interference technique which makes use of the different dependencies of s- and p- polarized beam optical pathlength on the variation of the angle of incidence is suggested for the detection of optical anisotropy [1]. Finally, a third method for detection of the effective anisotropy arising from surface roughness is conceived on the use of a universal relation between the Fresnel reflection coefficient  $r_s$  and  $r_p$ . Although the intensity reflectance measurements are insufficient for calculation of this universal relationship since they don't include information about phases of the  $r_s$  and  $r_p$  coefficients, we employed a simple 'jump phase' model in the vicinity of the Brewster angle and obtained an excellent agreement with the results received by the first method. One may expect that by using the ellipsometric data this method would be more enhanced.

[1] G.I. Surdutovich, J. Kolenda, J. Fragalli, L. Misoguti, R. Vitlina and V. Baranauskas, Thin Solid Films, (1966), in press.

(CNPq)

## FILMES AMORFOS DE MoO<sub>x</sub>: PROPRIEDADES ELETROCRÔMICAS

A. Lourenço<sup>1</sup>, A. Gorenstein<sup>1</sup> e J. Scarmínio<sup>2</sup>

<sup>1</sup>DFA/IFGW/UNICAMP, CP 6165 CEP 13084-970 Campinas SP, e-mail: annette@ifi.unicamp.br

<sup>2</sup> Depto Física, UEL, CP 86051 Londrina, Pr

**Palavras-Chave** : óxido de molibdênio, filmes finos, eletrocromismo

A intercalação eletroquímica em filmes finos de óxidos de metais de transição pode acarretar a mudança de suas propriedades ópticas (eletrocromismo). Se o processo de intercalação é reversível, estes materiais podem ser utilizados em dispositivos como espelhos retrovisores ou janelas. O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de filmes finos eletrocromicos de MoO<sub>x</sub> com propriedades otimizadas para uso em dispositivos. Os filmes foram depositados pela técnica de sputtering reativo (atmosfera O<sub>2</sub>+Ar) a partir de alvo metálico. Amostras com diferentes estequiometrias foram depositadas variando-se o fluxo de O<sub>2</sub> ( $\phi(O_2)$ ) durante a deposição, mantendo-se todos os outros parâmetros constantes. Os filmes mostraram-se amorfos frente à difração de Raios-X. As propriedades ópticas dos filmes foram estudadas por espectrofotometria, e o gap óptico estimado. O gap óptico situa-se entre 2.8 eV para baixos  $\phi(O_2)$  e 3.2 eV para altos  $\phi(O_2)$ . Estudou-se a intercalação de íons de lítio provenientes de meio aprótico (LiClO<sub>4</sub> em carbonato de propileno). As propriedades ópticas durante a intercalação eletroquímica foram analisadas em comprimento de onda fixo ( $\lambda = 632.8$  nm). As maiores variações de densidade óptica foram obtidas para amostras crescidas a baixos  $\phi(O_2)$  ( $\Delta OD = 0.25$  para uma carga intercalada de  $\Delta Q = 12$  mC/cm<sup>2</sup>). Para estes filmes,  $\Delta Q$  é maior que os valores descritos na literatura para filmes cristalinos. Para filmes depositados a altos valores de  $\phi(O_2)$ , tanto  $\Delta OD$  como a capacidade de carga apresentaram valores muito menores ( $\Delta OD = 0.04$  para  $\Delta Q = 4$  mC/cm<sup>2</sup>). Os resultados mostram que o comportamento óptico é fortemente dependente da cinética de intercalação e evidenciam a existência de sítios ópticamente ativos ou inativos, com concentração relativa dependente do  $\phi(O_2)$  utilizado na deposição.

(CNPq, FINEP)

## DEPOSIÇÃO ELETROQUÍMICA DE Cu SOBRE n-Si NO REGIME ANÓDICO - ASPECTOS TEÓRICOS

Paulo Cesar T. D'Ajello, Luiz Felipe O. Martins, André Avelino Pasa, João Cardoso de Lima, Claus Martin Hasenack

Departamento de Física/ CFM - UFSC

**Palavras-Chave**: Eletrodeposição, difusão, reação, sistemas dinâmicos.

A deposição eletro-química de filmes metálicos sobre semicondutores é um assunto atual em ciência e vem recebendo enorme atenção dos pesquisadores devido às grandes possibilidades de aplicação tecnológica que sugere. Independentemente dos apelos tecnológicos, justificados pela possibilidade de se depositar filmes a baixas temperaturas, pela tendência dos materiais eletrodepositados crescerem epitaxialmente e pela simplicidade dos processos que, além de tudo, são pouco onerosos, esse assunto desperta interesse acadêmico relacionado à pesquisa básica. Trata-se de sistemas abertos onde as prescrições da termodinâmica de não equilíbrio, com diversidade de processos simultâneos, pode ser aplicada e suas previsões verificadas experimentalmente. Neste trabalho desenvolvemos um modelo teórico para explicar a deposição de Cu sobre um substrato de silício. A deposição se processa sob condições que caracterizam o regime anódico no qual a deposição dos metais ocorre pela redução de íons positivos na superfície do substrato que funciona como ânodo. A migração de espécies químicas em direção a regiões de mais alta concentração reflete uma das situações típicas dos sistemas termodinâmicos distante do equilíbrio em que um determinado processo está acoplado a diversos fluxos e às forças generalizadas correspondentes. Para equacionar o processo irreversível que envolve a interação do substrato com a solução eletrolítica sob a ação de uma diferença de potencial elétrico, propusemos um conjunto de equações que descrevem o balanço de massa dos constituintes. Essas equações que acoplam os fluxos de matéria, as taxas de reação químicas e os fluxos de carga, permitem que se justifique a deposição anódica do Cu utilizando-se duas suposições: a dissolução do Silício que permite a redução dos cátions de Cu e a suposição de constantes de reação dependentes da diferença de potencial elétrico estabelecida. Os resultados permitem o traçado de um voltamograma que é comparado aos obtidos experimentalmente.

## HEXAMETILDISILOXANO-SF<sub>6</sub> POLIMERIZADO A PLASMA

Regiane Godoy, \*Sandra G. de Castro, Roberto Yzumi Honda, Milton Eiji Kayama  
Rogério Pinto Mota e Mauricio Antonio Algatti

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista,  
Campus de Guaratinguetá, 12500-000 Guaratinguetá, SP, Brasil  
\*Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física Gleb Wataghin,  
Universidade Estadual de Campinas, 13081-970 Campinas, SP, Brasil

*Palavras-Chave:* hexametildisiloxano, polímero, estrutura molecular

Materiais poliméricos podem ser crescidos sob a ação de descargas elétricas em vapores e gases orgânicos mantidos a baixa pressão. Estes polímeros podem adquirir o estado de filme fino de pó e mesmo de óleo, dependendo das condições da descarga, isto é: da potência, tensão, pressão e fluxo de gases, bem como da geometria do reator. Para alguns monômeros, a técnica de polimerização a plasma é possivelmente o único meio de transformá-los em polímeros sólidos. Neste trabalho estudamos a taxa de deposição, a estrutura molecular e a composição de uma mistura de Hexametildisiloxano (HMDSO) e Hexafluoreto de Enxofre (SF<sub>6</sub>) polimerizados a plasma. Os polímeros foram crescidos num reator de placas paralelas, onde o plasma foi gerado por corrente contínua de 300 a 1000 volts negativos e a pressão da mistura mantida entre 0,4 e 1,0 mbar. Para cada pressão a fração de SF<sub>6</sub> na mistura HMDSO-SF<sub>6</sub> variou de 10, 20, 40, 60, e 80 %. A taxa de deposição medida por microscopia interferométrica sobre os filmes depositados sobre as lâminas de vidro, variou entre 50 e 110 Å/min., aumentando em função da diminuição de SF<sub>6</sub> na mistura. A estrutura molecular dos filmes poliméricos investigada por espectrofotometria infravermelha, utilizando KBr como substratos, revelou absorções fortes entre 2960 e 2900 cm<sup>-1</sup>, características de vibrações C-H em CH<sub>2</sub> e CH<sub>3</sub>; ligações Si-H em 2150 cm<sup>-1</sup> e vibrações Si-CH<sub>2</sub> e Si-CH<sub>3</sub>, assim como Si-O-Si e Si-O-C entre 1200 e 800 cm<sup>-1</sup>. Entre 1500 cm<sup>-1</sup> e 1000 cm<sup>-1</sup> surge a ligação C-F, e a medida que a proporção de SF<sub>6</sub> é aumentada na mistura há uma substituição dos átomos de hidrogênio pelo de flúor na mistura. A composição elemental destes filmes poliméricos confirmou o aumento na fluoração investigada por espectroscopia ESCA a medida que os polímeros foram crescidos em proporções maiores de SF<sub>6</sub> na mistura.

## FILMES ELETROCRÔMICOS DE NiO, DEPOSITADOS POR RF-SPUTTERING

F.F. Ferreira<sup>1</sup>, M.H. Tabacniks<sup>1</sup>, M.C.A. Fantini<sup>1</sup>, I.C. Faria<sup>2</sup> e A. Gorenstein<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, USP, DFA, CP 663 18, 05389-970, São Paulo, SP

<sup>2</sup>Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, DFA, CP 6165, 13084-970, Campinas, SP

*Palavras-Chave:* eletrocromico, óxido de níquel, filmes finos

Materiais eletrocromicos mudam reversivelmente suas propriedades ópticas mediante intercalação eletroquímica sob ação de um campo elétrico. O objetivo deste trabalho é otimizar o desempenho eletrocromico de filmes finos de óxido de níquel (NiO<sub>x</sub>). Diferentes amostras foram crescidas por rf-sputtering reativo sobre substrato de vidro recoberto com ITO ou SnO<sub>2</sub>, utilizando um alvo de níquel em atmosfera de O<sub>2</sub> e Ar, variando o fluxo de O<sub>2</sub> ( $\phi$ ) e a potência rf (P). A taxa de deposição decresce com o aumento de  $\phi$  e cresce com o aumento de P. As amostras foram caracterizadas por voltametria cíclica, medidas de transmitância espectral (400 nm <  $\lambda$  < 2500 nm), tensão mecânica e transmitância monocromática *in-situ*. A intercalação foi realizada em eletrólito aquoso 0,1M de KOH. A estequiometria das amostras foi determinada por Rutherford Back-Scattering (RBS) e Elastic Recoil Spectrometry (ERS). A estrutura dos filmes foi investigada por difração de raios-X. Baixo fluxo de O<sub>2</sub> e alta potência rf dão origem a filmes mais transparentes devido a variações estequiométricas: a concentração de oxigênio cresce com o aumento de  $\phi$  e decresce com o aumento de P, enquanto que a concentração de hidrogênio apresenta comportamento oposto. A tensão mecânica é maior para filmes menos estequiométricos, concordante com medidas do parâmetro de rede das amostras em diferentes estados de coloração. O material possui a estrutura policristalina do NiO cúbico, com orientação preferencial na direção (111). O parâmetro de rede e o tamanho de grão na direção (111) aumentam com o aumento da concentração de oxigênio nas amostras. A orientação preferencial nas direções (111) e (200) tende a aumentar com a incorporação de oxigênio. Grãos cristalinos menores são encontrados para as orientações cristalográficas (200) e (220). A melhor eficiência eletrocromica, sendo 33,4 cm<sup>2</sup>/C, e menor variação de tensão mecânica, foram obtidas para a amostra crescida com  $\phi = 1$  sccm e P=100 W.

(CNPq, FAPESP, FINEP)

## UM MECANISMO PARA DEPOSIÇÃO QUÍMICA DE Cu SOBRE Si

*Sebastião G. dos Santos Filho<sup>\*</sup> e Claus M. Hasenack<sup>†</sup>*

<sup>\*</sup>LSI/PEE/USP - São Paulo

<sup>†</sup>LabFES/LEC - Departamento de Física - CFM - UFSC

**Palavras-Chave:** deposição química, filmes finos, semicondutores

A limpeza final de lâminas de silício com HF é bastante empregada em microeletrônica, apesar do inconveniente de poder resultar em contaminação superficial da lâmina com cobre. Visando contribuir para o esclarecimento e compreensão do mecanismo através do qual esta deposição ocorre, procedeu-se neste trabalho à imersão de pastilhas de silício tipo p, orientação (100) e resistividade de 10 a 20 $\Omega$ cm em soluções de HF *intencionalmente* contaminadas com concentrações conhecidas de íons de cobre (100 a 500 ppm). O processo de deposição foi realizado em uma cuba de TEFLON, com ou sem agitação da solução pela própria amostra. Para o preparo da solução, sulfato ou cloreto de cobre foi adicionado à água deionizada (para obter a concentração de cobre desejada) à qual posteriormente foi adicionado determinado volume de HF. As pastilhas tiveram metade de sua área exposta à solução cobertas com cera Apiezon visando a deposição seletiva de cobre. Após a deposição, foram retiradas, secadas com nitrogênio e a camada protetora de Apiezon removida. Como técnicas de análise, utilizou-se espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS) e perfilometria.

Das análises realizadas pode ser inferido que para cada átomo de cobre que é depositado um átomo de silício é removido do substrato, fato importante para estabelecer a reação química geral de deposição do cobre.

Durante a imersão, dissolução de silício foi observada em adição a processo simultâneo de oxidação na interface cobre-silício, como concluído a partir dos espectros RBS. Bolhas de um gás não-inflamável e incolor evoluindo da superfície das lâminas também foram observadas durante a deposição.

A partir dos vários resultados, é proposto um mecanismo eletroquímico para a deposição química de cobre, o qual também explica o sinal do oxigênio observado nos espectros RBS.

(FAPESP/PADCT)

## PRODUÇÃO DE FILMES FINOS DE SULFETO DE CHUMBO POR PAREDES QUENTES

*Rubem Cruz de Aragão*

Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento (CTEx) - RJ

*Carlos Luiz Ferreira e Júlio Cesar Soares de Oliveira*

Instituto Militar de Engenharia - RJ

**Palavras-Chave:** detetores, filmes finos, sulfeto de chumbo

Há vários anos, diversos materiais vêm sendo pesquisados para utilização como sensores de radiação eletromagnética na faixa do infravermelho. Tais pesquisas têm sido estimuladas devido à necessidade cada vez maior do sensoriamento remoto dos diversos setores industriais. Pode-se citar o emprego dos materiais fotosensíveis como sensores de temperatura em aplicações médicas para microdiagnóstico local, em sistemas de segurança e vigilância para alerta contra aumento de temperatura, aplicações civis e militares para visão noturna, controle de aeronaves etc. Dentre os diversos materiais pesquisados encontra-se o sulfeto de chumbo, PbS, que é utilizado como sensor na faixa de 1  $\mu$ m a 2,5  $\mu$ m de comprimento de onda do espectro de radiação eletromagnética. A grande vantagem deste material é que, nesta faixa, os detetores não necessitam de resfriamento para utilização.

Filmes finos de PbS foram depositados pela técnica de paredes quentes a partir do material na forma de pó produzido pela CERAC com pureza de 99,99%, com uma pressão base de evaporação de  $2 \times 10^{-6}$  mbar. A temperatura da fonte foi variada entre 680°C e 760°C, a temperatura da parede entre 350°C e 400°C e a temperatura do substrato entre 200°C e 250°C. A estrutura dos filmes foi determinada através da difração de raios X com ângulos de incidência e de detecção acoplados e incidência rasante, a morfologia por microscopia eletrônica de varredura, a composição através da espectroscopia por energia dispersiva (EDS), a concentração e o tipo de portadores por medidas de efeito Hall.

Concluiu-se que o sistema de paredes quentes possibilitou a produção de filmes estequiométricos, sem a necessidade de uma fonte extra de enxofre e que estes filmes são fotosensíveis no infravermelho entre 1  $\mu$ m a 2,5  $\mu$ m de comprimento de onda do espectro de radiação eletromagnética. (MEX e CAPES)

## Nitretação Iônica no aço ferramenta EH12: método de pulsado e não pulsado

*Eduardo José Miola\**, *Sylvio Dionysio de Souza\*\**, *Maristela O. Dionysio de Souza\*\** e *Dirceu Spinelli\**

\* Departamento de Materiais - Escola de Engenharia de São Carlos-USP

\*\* Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

*Palavras-Chaves:* aço, nitretação, iônica

A nitretação iônica é um processo de tratamento termoquímico, que por absorção de nitrogênio se consegue dureza extraordinária nas superfícies dos aços, possibilitando a melhoria das propriedades dos materiais tais como resistência ao desgaste. Neste trabalho comparamos os resultados da nitretação feita em um equipamento de pulsado com um de contínuo. O aço escolhido EH12 (composição química 0,37%C, 5,0%Cr, 1,4%Mo, 0,4%Mn, 1,2%W, 0,3V) oferece boa resistência à oxidação e erosão. As amostras foram temperadas na faixa de temperatura de 980°C à 1050°C, e revenidas a temperatura de 550°C. Em seguida as amostras foram nitretadas com os seguintes parâmetros: temperatura de 500°C, mantendo a pressão de gás a 4 Torr, variando apenas o tempo de tratamento de 0.5h-10h. Após a nitretação, as amostras foram submetidas a análise metalográfica, onde se observou que para tempos muito curtos a camada nitretada não é homogênea. Para tempo mais longos a máxima formação da camada branca e sua evolução para camada escura ocorre entre 3h e 10h, para nitretação de pulsado e contínuo. Na medida de microdureza das amostras notou-se que esta independe do tempo de tratamento, os resultados são similares para os dois processos de nitretação. As composições das camadas nitretadas foram examinadas por difração de raios x, que detectou as fases  $\epsilon$  e  $Fe_3C$ , para nitretação de contínuo, enquanto para de pulsado a diminuição na formação de  $Fe_3C$ , com o aumento das fases  $\epsilon$  e  $\gamma$ . Concluímos que: 1) o número de microporos pode ser reduzido na nitretação de pulsado, além da redução do potencial de plasma; 2) com o de pulsado a formação de  $Fe_3C$  na camada pode ser controlado, em relação ao de contínuo e a quantidade de  $\epsilon$  e  $\gamma$  pode também ser influenciada.

(CAPES)

## “DYNAMIC ION-BEAM MIXING” DE Ni-Si

*Masao Matsuoka, José Fernando Diniz Chubaci, Jochen Peter Biersack, Gita Kukavka  
Guinsburg e Shiguo Watanabe*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

*Naoto Kuratani e Kiyoshi Ogata*

R & D Division, Nissin Electric Company, Ltd., Kyoto, Japão

*Paravras-Chave:* “ion-beam mixing”, filme fino de Ni, simulação Monte Carlo

Interações metal-silício têm sido ativamente estudadas e a compreensão desses fenômeno é um dos assuntos mais importantes do ponto de vista tecnológico. Nesse trabalho são relatados tanto os resultados experimentais de interações Ni-Si induzidas por feixe de íons  $Ar^+$  como os resultados teóricos de simulações correspondentes usando o programa de simulação Monte Carlo, T-DYN. Filmes finos de Ni foram formados sobre substratos de Si(100) à temperatura ambiente com a deposição de vapor de Ni e o bombardeamento simultâneo por íons  $Ar^+$  (método de “dynamic ion-mixing”). A fluência de feixe iônico e a razão de transporte Ni/Ar foram fixadas a  $9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  e 5, respectivamente; a energia de íons  $Ar^+$  foi selecionada de 2, 5, 10 e 20 keV. A composição, a estrutura cristalina e o crescimento de cristal foram observados, respectivamente, com “Auger Electron Spectroscopy (AES)”, “X-Ray Diffraction (XRD)”, “Scanning Electron Microscopy (SEM)”. A dureza dos filmes foi medida com analisador de dureza “Knoop”. O resultado de SEM mostra que a estrutura colunar do filme fica mais nítida com o aumento da energia de íons e que a espessura do filme cresce também com o aumento da energia de íons, coincidindo com o resultado da medida de espessura feita independentemente com o medidor de forma superficial. Na energia de íons de 20 keV, há alguns picos de XRD associados com silicetos de Ni, tais como NiSi, Ni<sub>2</sub>Si e Ni<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>, sugerindo a formação de nova fase intermediária mista de Si e Ni. O resultado de AES prova claramente essa formação; o aumento na dureza na energia de íons de 20 keV corresponde à formação de silicetos de Ni. Um ajuste teórico do resultado de AES foi tentado com o programa T-DYN. (FAPESP, CNPq)

## PASSIVAÇÃO DE COBRE CONTRA OXIDAÇÃO POR MEIO DE IMPLANTAÇÃO IÔNICA

*Manfredo H. Tabacniks<sup>1</sup>, John E.E. Baglin<sup>2</sup>, Andrew J. Kellock<sup>2</sup>, Norman S. Somcio<sup>2,3</sup>  
e Tsing T. Bardin<sup>2</sup>.*

1) Instituto de Física - USP, 2) IBM Almaden Research Center, CA, EUA, 3) San Jose State University, CA, EUA

*Palavras-Chave:* implantação iônica, corrosão, cobre

É comum observar em chapas ou filmes de cobre, analisados por RBS e armazenados por algum tempo, a reluzente marca do feixe não corroída. Apesar do fenômeno ser conhecido há muito tempo não há ainda uma explicação totalmente consistente. Conforme nossas observações, o principal efeito parece ser a involuntária deposição e fixação de compostos contendo carbono na superfície da amostra em ar antes da implantação. O filme de carbono é extremamente fino, com cerca de  $10^{15}$  átomos/cm<sup>2</sup> e tem menos de 30Å de espessura. Sua detecção foi feita com espalhamento ressonante tipo  $^{12}\text{C}(p,p)^{12}\text{C}$  em 1.7MeV. A proteção à corrosão foi atribuída ao efeito dos íons implantados no metal, apesar da inevitável presença da fina camada carbonácea. Para investigar o efeito da implantação na total ausência de carbono seguiram-se dois caminhos: 1) depositou-se seqüencialmente sobre a superfície de cobre a ser oxidada um filme de Al com 300Å de espessura, através do qual se fez a implantação que depois foi removido quimicamente. Um resultado preliminar indicou ausência de proteção. 2) Numa câmara de ultra alto vácuo ( $10^{-11}$ Torr), isenta de fontes de carbono e dotada de um pequeno evaporador, filmes de cobre foram preparados e implantados "in situ" sem contacto com ar. Este trabalho tem duplo interesse: Permitirá estudar o efeito da implantação iônica sem a interferência da usual e indesejada camada de carbono e poderá colaborar na compreensão dos processos de deposição e fixação de filmes de carbono extremamente finos em superfícies metálicas, assunto de vital importância na tecnologia de discos magnéticos. (FAPESP)

## EFEITO DE ENERGIA DE ÍON E RAZÃO DE TRANSPORTE NA COMPOSIÇÃO DE FILMES DE ÓXIDO DE ZIRCÔNIO PREPARADOS COM "ION-BEAM ASSISTED DEPOSITION"

*Masao Matsuoka e Sadao Isotani*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP

*Shoji Miyake e Yuichi Setsuhara*

Welding Research Institute, Osaka University, Osaka, Japão

*Kiyoshi Ogata e Naoto Kuratani*

R & D Division, Nissin Electric Co. Ltd., Kyoto, Japão

*Palavras-Chave:* óxido de zircônio, "ion-beam assisted deposition", XPS

Filmes de óxido de zircônio possuem propriedades úteis, tais como alto coeficiente de dilatação térmica, baixa condutividade térmica e alto índice refrativo e, por isso, têm atraído muita atenção. O presente trabalho relata a deposição de óxido de zircônio sobre um substrato de Si(111) por evaporação de Zr por feixe eletrônico com bombardeamento simultâneo por íons O (método de "ion-beam assisted deposition"), em função dos parâmetros de deposição fundamentais: a energia de íons e a razão de transporte O/Zr, ARR(O/Zr). A energia de íons foi escolhida de 2, 5, 10 e 20keV e a ARR(O/Zr) foi fixa de 0,54 e 1,09. A técnica de "X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)" foi usada para estudar a oxidação e a composição dos filmes formados. Análises de XPS exibem a presença de quatro estados de oxidação de Zr ( $\text{Zr}^{4+}$ - $\text{Zr}^{1+}$ ) nos espectros de Zr 3d e dois picos nos espectros de O 1s;  $\text{Zr}^{4+}$  é o íon predominante em todos os filmes e dois picos no espectro de O 1s estão relacionados com o óxido e com grupos de hidroxilo e/or carbonatos, respectivamente. O estudo de análises da composição dos filmes sugere que essas espécies associadas com O podem estar ligadas ao Zr. A razão da composição dos filmes O/Zr, CR(O/Zr), decresce com o aumento da energia de íons e então começa a crescer a 10 keV. A variação da CR(O/Zr) em função da energia de íons e ARR(O/Zr) pode ser explicada com "sputtering" preferencial de Zr por íons de O e com a incorporação de íons de O dentro do filme. (FAPESP)

## Morphology of sputtered surfaces: a Monte Carlo simulation

Rejane M. Ribeiro-Teixeira and Paulo M. Mors

Instituto de Física, UFRGS, Caixa Postal 15051, 91.501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

**Key words:** Monte Carlo simulation, sputtering, surface physics

The evolution of the morphology of sputtered surfaces was studied using an on-lattice Monte Carlo simulation model. Our motivation is an extensive investigation of the CdTe(001) surface, that has been done by grazing incidence X-ray diffraction (GIXD) and scanning tunneling microscopy (STM)<sup>(1)</sup>. The GIXD in-situ study of layer-by-layer removal of the CdTe(001) surface by ionic bombardment with Ar<sup>+</sup> has shown the evolution of the surface roughness<sup>(2)</sup>. The oscillatory nature of the GIXD signal intensity has suggested a layer-by-layer desorption and that the amplitude of oscillations strongly depends on the substrate temperature. A strong anisotropy has been observed along the [1 1 0] and [1 -1 0] directions. It seems to occur the existence of periodic faults in the [1 1 0] direction limiting the domain size in that direction with respect to the [1 -1 0] one. Our aim in this work was to investigate the behaviour of the surface roughness for this present experimental case. Such a system is ideally suited to examination with stochastic computer simulations. The simulations were carried out on square 40 x 40 lattices and rectangular 13 x 130 lattices. Periodic boundary conditions were imposed over these regions. The thermal conditions of the substrate and the sputtering rates were taken into account through a parameter adjustable to the proper experimental conditions<sup>(2)</sup>. We present the results of the simulations for different temperatures of the substrate, and for different coverages of the surface. Our calculations of the surface step density allow a qualitative comparison with the experimental results. In the case of the rectangular lattices we obtain a reasonable confirmation of the anisotropy found in the CdTe(001) surface.

(1) M. B. Veron et al., Appl. Phys. Lett. 67, 3957(1995); Appl. Phys. Lett. 67, 1680(1995); Surf. Scien. Lett. 347, L55(1996); Phys. Rev. B 51, 14806(1995).

(2) M. B. Veron et al., J. Cryst. Growth in press.

## ESTUDO DO PERFIL DE IMPLANTAÇÃO EM SI CRISTALINO

G.M. Azevedo, J.C. Martini, J.H. R. dos Santos, P.L Grande e M. Behar

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves  
9500, 91501-970, Porto Alegre, Brasil

**Palavras-Chave :** channeling, energy loss, range

O estudo teórico-experimental do poder de freamento eletrônico de feixes carregados penetrando alvos sólidos tem sido alvo de intensa investigação nos últimos anos. No instituto de física da UFRGS este estudo tem sido realizado através da implantação de ions leves como He e B tanto em alvos cristalinos em direção canalizada quanto em alvos amorfos. No momento estamos estendendo este estudo para elementos mais pesados como Bi e Au. Nesta última linha de pesquisa os dados experimentais são praticamente inexistentes. Neste trabalho apresentamos dados experimentais relativos ao perfil de implantação de Bi em alvos de Si cristalino e Si amorfo. As nossas previsões teóricas são obtidas por intermédio do programa de simulação "Marlowe", que simula as cascatas de partículas geradas quando um feixe de ions penetra um alvo sólido. Confrontamos os resultados experimentais com os perfis obtidos por intermédio de simulações e mostramos o efeito da utilização no "Marlowe" de diferentes modelos de perda de energia eletrônica nos perfis de implantação simulados. Mostraremos também que as diferenças observadas estão relacionadas tanto ao modelo de perda de energia eletrônica utilizado nas simulações quanto à deformação da nuvem eletrônica do sistema ion-alvo o que afeta a transferência de energia aos átomos do cristal de Si.

(CNPq, FAPERGS)

## BOMBARDEIO DE LiF POR ÍONS DE NITROGÊNIO : ANÁLISE DA TRANSIÇÃO ENTRE O SPUTTERING NUCLEAR E ELETRÔNICO.

*João Alerto Mesquita Pereira, Enio Frota da Silveira, Claudia Castro, Karl Wien*

Departamento de Física  
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – RJ

*Palavras-Chave: sputtering, energia cinética*

São apresentados resultados referentes à energia cinética de íons emitidos de uma superfície de LiF bombardeada por feixes de nitrogênio com energias variando de 0.30 até 6.0 MeV. Além da determinação da distribuição de energia cinética inicial, obtida através do método de tempo-de-vôo, os rendimentos de emissão (número de íons detetados por projétil) também foram medidos.

Dentre os casos analisados, é notável a semelhança entre os dados relativos à emissão de  $H^+$  e  $H_2^+$ . Estes íons apresentam a mesma distribuição de energia cinética inicial e o mesmo comportamento do rendimento de emissão no que concerne à variação da carga e energia dos projéteis. A similaridade entre todas as distribuições obtidas corrobora com a conclusão de que a emissão desses íons resulta de um processo de desexcitação eletrônica de moléculas adsorvidas no LiF (dessorção induzida por transições eletrônicas).

Os íons  $Li^+$  e  $F^-$  possuem características de emissão bastante diferentes das apresentadas pelos íons  $H^+$  e  $H_2^+$ . Para projéteis com energias abaixo de 0.50 MeV, esses dois íons apresentam comportamento típico da emissão devida à uma cascata de colisões ou sputtering nuclear. Isso é identificado através do comportamento assintótico da distribuição de energia cinética. Para energias incidentes acima de 1 MeV, a emissão  $F^-$  continua apresentando características de sputtering nuclear, enquanto o comportamento da emissão do  $Li^+$  se modifica. Isto é, o rendimento de emissão do íon  $F^-$  decresce acompanhando a perda de energia nuclear enquanto o de  $Li^+$  aumenta, passando por um máximo próximo de 2.0 MeV.

Tais resultados são compatíveis com a interpretação de que as ionizações produzidas pelo projétil provocam uma alta densidade de carga positiva acarretando numa explosão coulombiana que expelle o  $Li^+$  (sputtering eletrônico). Nesse processo, a emissão de  $F^-$  é inibida.

## ESTUDO DA CINÉTICA DA TRANSFORMAÇÃO DE FASES EM FILMES FINOS, ATRAVÉS DE MEDIDAS DE RESISTIVIDADE ELÉTRICA *IN SITU*, DURANTE A IMPLANTAÇÃO IÔNICA.

*Rosalvo Mário Nunes Miranda, Marcos Antonio Zen Vasconcellos, Mario Norberto Baibich*  
Instituto de Física, UFRGS

*José Antônio Trindade Borges da Costa*

Departamento de Física, UFSM

*Palavras-chave: Implantação Iônica, Resistividade Elétrica, Filmes Finos*

Foram realizadas medidas de resistividade elétrica, à temperatura de 77K, em filmes finos homogêneos da fase  $\beta$ -NiAl com espessuras de 25; 37,5; 50; 62,5 e 75 nm, durante a irradiação com íons de  $Ar^+$  com energia de 120 keV e correntes inferiores a 100 nA/cm<sup>2</sup>. As amostras foram expostas ao bombardeamento até doses de  $2,5 \cdot 10^{15}$  íons/cm<sup>2</sup>, e foram analisadas por Difração de Raios-X, Microscopia Eletrônica e Retroespalhamento de Rutherford (RBS). Os resultados da resistividade foram obtidos em um criostato constituído especificamente para este fim. Todo o conjunto de resultados foi interpretado segundo três modelos diferentes. O primeiro destes é o modelo de Gibbons de duas fases, na forma originalmente apresentada. O segundo modelo é uma modificação proposta neste trabalho, onde é considerado um modelo semelhante ao Gibbons, de três fases e acrescido de um termo de dependência em profundidade dos aglomerados de danos. O terceiro modelo é um caso particular da Teoria Estocástica da Cinética de Modificação de Sólidos Irradiados a Baixas Temperaturas com Partículas Atômicas desenvolvida por Borges da Costa, também com a introdução de uma dependência da profundidade dos aglomerados de danos. A análise do conjunto de resultados obtidos sugere que:

- As transformações de fase de resistividade induzidas por irradiação estão relacionadas à deposição de energia e produção de defeitos na amostra.
- As transformações provocadas pela irradiação sugerem uma estrutura nos aglomerados de danos.
- A análise dos resultados revela ser indispensável a inclusão da dependência em profundidade dos efeitos de irradiação para a descrição completa dos fenômenos observados.

## FORMAÇÃO DE FASES EM SISTEMAS SÓLIDOS BINÁRIOS FORA DE EQUILÍBRIO

*Paulo Cesar T. D'Ajello*  
Departamento de Física/ CFM - UFSC

*Palavras-Chave:* balanço de massa, irradiação, reação, difusão

Sistemas sólidos metálicos, inicialmente estruturados em bicamadas finas, quando submetidos a bombardeamento com íons energéticos pesados apresentam variação composicional. A mistura atômica que se desenvolve auxiliada pela radiação ocasiona o aparecimento de fases metálicas com estequiometria bem definida. Embora esteja bem estabelecida a relação entre a formação dessas fases e diversos processos que se desenvolvem durante a irradiação como: difusão, produção de defeitos com dependência espacial, taxa de deposição de energia e cinética de reações, a forma como essas diferentes contribuições se associam para determinar o aparecimento de estruturas particulares não é compreendida. Neste trabalho apresentamos duas aproximações que incorporam os mecanismos acima discriminados numa descrição unificada da formação de fases metálicas em bicamadas irradiadas. Em uma das aproximações as fases se estruturam independentemente das regras dinâmicas que definem as reações. Surgem unicamente como consequência da cinética de difusão pela introdução de um coeficiente de difusão dependente de posição e da concentração relativa dos elementos difundentes. Uma segunda aproximação explora a reação entre os elementos utilizando regras de formação de fase e representando o processo total através de um conjunto de equações de difusão-reação similar as utilizadas para tratar sistemas químicos fora do equilíbrio. Estuda-se o caso particular da bicamada Fe/Al irradiada com íons de Ar a temperatura de 500 K. O resultado mais interessante é a verificação de que na primeira aproximação as fases crescem simultaneamente mas em regiões separadas no espaço ao passo em que a segunda aproximação verifica o crescimento simultâneo das fases com sobreposição espacial das mesmas.

## EFEITO DO RECOZIMENTO SOBRE O CONTEÚDO DE H EM PELÍCULAS DE a-Si:H DOPADAS POR IMPLANTAÇÃO IÔNICA

*F.J. Fonseca, E.A.T. Dirani, C.A. Sassaki, A.M. Andrade, A. Takahashi*  
Laboratório de Microeletrônica, DEE - Escola Politécnica da USP  
C.P. 8174 - 01065-970 - São Paulo (SP), Brasil  
E-mail: [dirani@lme.poli.usp.br](mailto:dirani@lme.poli.usp.br)

*Palavras-Chave:* silício amorfo, dopagem, implantação iônica.

A dopagem por implantação iônica é uma técnica adequada para obter películas de silício amorfo hidrogenado (a-Si:H) de elevada condutividade. Em amostras com espessuras da ordem de 300 nm a 400 nm obteve-se valores de condutividade de até  $10^{-2}$  S/cm. Para ativar os dopantes e reduzir o número de defeitos, devidos à implantação, utiliza-se uma etapa de recozimento durante ou após a implantação. Verificou-se, através do estudo da condutividade no escuro, que a melhor temperatura de recozimento, considerando-se isoladamente a camada dopada, é em torno de 320°C. Este trabalho analisa o efeito do recozimento sobre a condutividade no escuro e sobre o conteúdo de Hidrogênio em películas de a-Si:H dopadas com fósforo por implantação iônica. Estas camadas dopadas serão utilizadas para a formação de contatos injetores de Transistores de Filme Fino de a-Si:H. Foram utilizadas películas de a-Si:H depositadas em um reator PECVD. A camada dopada foi obtida através de implantação iônica múltipla com energias entre 15 KeV e 120 KeV. O recozimento foi realizado em vácuo a temperaturas entre 100°C e 400°C. O conteúdo de Hidrogênio e a forma de incorporação dos hidretos foram obtidos através da análise do espectro de absorção no infravermelho (FTIR). São apresentados os resultados da correlação entre os modos de ligação do hidrogênio e a temperatura de recozimento que explicam a otimização das características das películas.

## REVESTIMENTO SUPERFICIAL POR IMPLANTAÇÃO DE ÍONS DE CARBONO EM AÇO PARA LIMITAR A CONTAMINAÇÃO POR HIDROGÊNIO

Marlete A. Zamprônio\* e Paulo E. V. de Miranda\*\*

\*Universidade Estadual de Maringá-Departamento de Física-PR

\*\*Universidade Federal do Rio de Janeiro-Engenharia Metalúrgica-RJ.

*Palavras-Chave:* hidrogênio, revestimentos, permeação

A crescente utilização da engenharia de superfícies na indústria metalúrgica com o objetivo de aumentar a dureza superficial, resistência ao desgaste, fadiga e corrosão, tornou necessário o conhecimento do comportamento destes novos materiais quando colocados em ambiente contendo hidrogênio. Foi escolhido como substrato o aço grau API 5L X-65 de alta resistência e baixa liga com composição química (% em peso): C=0,11; Mn=1,05; S=0,005; P=0,014; Si=0,29; Al=0,035; Nb=0,0074; V=0,055; Ti=0,010; Ni=0,15; Cu=0,31; Ca=0,0074; Fe=remanescente. A microestrutura consiste de ferrita e perlita bandada. As implantações iônicas foram feitas em um dos lados das amostras nas seguintes condições: amostra tipo I, energias de 54 e 130 KeV e doses de  $4,40 \times 10^{13}$  e  $1,00 \times 10^{16}$  ions.cm<sup>2</sup>, respectivamente; amostra tipo II, energias de 130 e 250 KeV e doses de  $1,40 \times 10^{16}$  e  $1,55 \times 10^{16}$  ions cm<sup>2</sup>, respectivamente e amostra tipo III, energias de 50 e 130 KeV e doses de  $1,40 \times 10^{16}$  e  $1,40 \times 10^{16}$  ions cm<sup>2</sup>, respectivamente. Estas camadas foram estudadas utilizando-se ensaios eletroquímicos de permeação do hidrogênio duplo-potenciostato à temperatura de 35°C em solução eletrolítica de NaOH 0,1N. Os parâmetros de permeação do hidrogênio obtidos para o aço não implantado são: coeficiente de difusão do hidrogênio aparente,  $D_{ap}=1,5 \times 10^{-10}$ ; solubilidade do hidrogênio aparente,  $S_{ap}=1,3$  mol H m<sup>-3</sup> e permeabilidade do hidrogênio no estado estacionário,  $P_{\infty}=1,9 \times 10^{-10}$  mol H m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>. Os testes de permeação do hidrogênio conduzidos sobre a superfície implantada produziram as seguintes permeabilidades do hidrogênio no estado estacionário: amostra tipo I,  $P_{\infty I}=2,3 \times 10^{-10}$  mol H m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>; amostra tipo II,  $P_{\infty II}=1,8 \times 10^{-10}$  mol H m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> e para amostra tipo III,  $P_{\infty III}=1,6 \times 10^{-10}$  mol H m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>. Estes resultados mostram que o revestimento superficial por implantação de íons de carbono, dependendo das condições de implantação, pode tanto acelerar quanto impedir a contaminação por hidrogênio.

## ESTUDO DO EFEITO DO BOMBARDEIO IÔNICO NO PPS.

M. R. Rizzatti<sup>1</sup>, M. A. Araújo<sup>2</sup> e R. P. Livi<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, PUCRS RS

<sup>2</sup>Instituto de Química e <sup>3</sup>Instituto de Física, UFRGS RS

*Palavras-chave:* PPS, oxidação, bombardeamento iônico

O estudo das modificações induzidas por bombardeio iônico na estrutura física e química em materiais poliméricos tem chamado a atenção de pesquisadores tanto por questões fundamentais como por razões tecnológicas. Contudo há pouca informação sobre mudanças específicas na estrutura química criada após a passagem destes íons energéticos nestes materiais. Com este objetivo bombardeou-se filmes poliméricos de Poli(Sulfeto de Parafenileno), PPS, de 2 μm de espessura com H<sup>+</sup> (300 keV), He<sup>+</sup> (380 keV), B<sup>+</sup> (350 keV) e Ar<sup>++</sup> (700 keV). Espectros infravermelhos foram obtidos na faixa de 4000-400 cm<sup>-1</sup> no sistema Perkin-Elmer FTIR-1750, a análise química elementar CHN no sistema Perkin-Elmer CHN-2400 e a análise de retroespalhamento Rutherford, RBS, executada no mesmo implantador HVEE 400 kV onde as amostras foram primeiramente bombardeadas. Verifica-se através do efeito dose para os diferentes íons no PPS, que as ligações acíclicas S-S e C-S são as mais susceptíveis ao bombardeamento iônico, levando a formação de defeitos reativos. Após o bombardeio iônico, dá-se com a exposição da amostra à atmosfera, o envelhecimento da mesma. O envelhecimento do filme é um processo oxidativo e decorre da absorção, via radical livre, dos elementos da atmosfera: oxigênio e nitrogênio. A presença destes foi detectada pelas análises RBS e CHN, respectivamente. Este processo é função direta da dose iônica e do tempo de exposição da amostra à atmosfera e leva a formação de ligações C=O, S-O, S=O, C-O e em menor proporção das ligações C=N, C-N, as quais participam do processo de reticulação. A estrutura química do PPS é drasticamente alterada através do mecanismo eletrônico de deposição de energia induzido pelo feixe de íons, sendo que o processo de recombinação das ligações químicas depende da eficiência de cada íon na indução de eventos degradativos.

## ENHANCEMENT OF SECOND HARMONIC GENERATION UNDER REFLECTION OF AN ELECTROMAGNETIC WAVE FROM A LOW RELIEF SURFACE

R.Z.Vitlina, G.I.Surdutovich and V.Baranuskas

Depto de Semicondutores e Fotônica, FEE, UNICAMP, 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

*Palavras-Chave:* surface, roughness, generation

As was shown earlier in a general case of incident electromagnetic wave the reflection coefficients due to the presence of a low relief at an interface between two linear media may be described in terms of the effective-permittivity tensor  $\hat{\epsilon}^{ef}$  of a layer that includes all the irregularities and that is bracketed by two homogeneous half-spaces [1]. In the case of gently slopping and steep irregularities, the components of this tensor have been analytically calculated. Here we solve the problem of the reflected second-harmonic generation (RSHG) from a low relief surface on the boundary between a linear medium and a medium with quadratic nonlinear susceptibility tensor. The detailed calculations were carried out for vacuum bordering of the medium with a dielectric permittivity  $\epsilon$  and a nonlinear susceptibility tensor  $\hat{\chi}$ . We assumed a low surface relief with heights  $h$  and horizontal sizes  $l_x, l_y$ , that are much smaller than the wavelength  $\lambda$  of the incident light. We choose the thickness  $H$  of the effective surface layer in the limit  $l_x, l_y, h \ll H \ll \lambda$ . Clearly, the concrete choice of  $H$  does not influence on the calculated values. The effective nonlinear polarization is introduced by averaging over the layer's volume. The electric field of the RSHG is determined by averaging over the volume of a single irregularity of the SH field inside this irregularity. After the determination of the effective nonlinear polarization the problem is reduced to the calculation of the SHG intensity from a semi-infinite space  $Z < -H/2$ , with parameters  $\epsilon$  and  $\hat{\chi}$ , and a film located at  $-H/2 \leq Z \leq H/2$  with parameters  $\hat{\epsilon}^{ef}$  and  $\hat{\chi}^{ef}$ . The analytic results are obtained for gently slopping and for inclined steep asymmetric irregularities. In the case of a flat boundary and non-center symmetrical medium RSG is not generated, whereas with account of steep asymmetric irregularities it do arise.

[1] R.Z.Vitlina and A.M.Dykhne, Sov.Phys.JETP, 76, 983 (1992).

(CNPq)

## ESTADO INTEMEDIÁRIO NÚMERO-COERENTE DO CAMPO LUMINOSO QUANTIZADO

S.C.G.Granja, B.Baseia e G.C.Marques

Instituto de Física, Universidade de São Paulo  
Cx.Postal 66.318, CEP 05389-900 - São Paulo(SP).

*Palavras Chave:* efeitos não clássicos, estados intermediários, interpolação.

Em 1985, Stoler et al[*Opt.Acta* 32, 345(1985)] introduziram o estado binomial  $|\eta, M\rangle$ , intermediário entre o estado de número  $|n\rangle$  e o estado coerente  $|\alpha\rangle$ . As variáveis  $\eta$  e  $M$  são parâmetros interpoladores, levando o estado binomial  $|\eta, M\rangle = \sum_{n=0}^M \beta_n^M(\eta) |n\rangle$  ao estado  $|n\rangle$  no limite  $\eta \rightarrow 1$ ,  $M$  arbitrário, e ao estado  $|\alpha\rangle$  no limite  $\eta \rightarrow 0$ ,  $M \rightarrow \infty$ , mantendo  $\eta M = |\alpha|^2$ , finito. Diversas propriedades, especialmente efeitos não clássicos exibidos por esse estado, foram investigadas primeiro por Stoler, e depois por seguidores desse estudo. Dentre elas citamos a ocorrência de estatística sub-Poissoniana, efeito anti-bunching e squeezing - no campo luminoso. Na interação com a matéria, usando modelo de Jaynes-Cummings, foi investigado o efeito de "colapso & revival" na inversão atômica,  $\langle \hat{\sigma}_z(t) \rangle$ . Seguindo essa linha de estudos, outros estados intermediários do campo luminoso foram introduzidos mais recentemente, seja do tipo gerado por uma única fonte, seja do tipo gerado por duas fontes. Esse último tipo, da forma  $|\Psi(\xi, \phi)\rangle = N(\xi, \phi) [\sqrt{\xi} |\Psi_1\rangle + \sqrt{1-\xi} \exp(i\phi) |\Psi_2\rangle]$  interpola entre os estados genéricos  $|\Psi_1\rangle$  e  $|\Psi_2\rangle$ . Assim,  $|\Psi(1, \phi)\rangle = |\Psi_1\rangle$  e  $|\Psi(0, \phi)\rangle = |\Psi_2\rangle$ , de modo que  $\xi$  é o parâmetro interpolador. No presente trabalho, introduzimos o novo estado interpolador, alternativo ao estado binomial de Stoler,  $|\Psi(\xi, \phi)\rangle = N(\xi, \phi) [\sqrt{\xi} |n\rangle + \sqrt{1-\xi} \exp(i\phi) |\alpha\rangle]$  o qual interpola entre os estados  $|n\rangle$  e  $|\alpha\rangle$ , para  $\xi = 1$  e  $\xi = 0$ , respectivamente. O objetivo aqui foi comparar as propriedades exibidas por esse novo estado interpolador. Da última equação obtemos: a probabilidade  $p_m(\xi, \phi)$  de encontrar  $m$  fótons no estado  $|\Psi(\xi, \phi)\rangle$ ; o fator de Fano  $F(\xi, \phi) = \Delta \hat{n}^2 / \langle \hat{n} \rangle$ ; as variâncias nas quadraturas  $\hat{x}_1 = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/2$ ,  $\hat{x}_2 = (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/2i$ , etc. A comparação desses resultados com aqueles obtidos no estado binomial mostra que, para certo intervalo do parâmetro interpolador  $\xi$ , o novo estado exibe efeitos não-clássicos (dos tipos mencionados) mais pronunciados que aqueles obtidos no estado binomial, conforme conveniente escolha do parâmetro de coerência  $\phi$ .

(CNPq)

## **PROPRIEDADES DE FASE DOS ESTADOS DO CAMPO**

Humberto X. Guimarães e Célia M. A. Dantas

Universidade Federal de Goiás - Departamento de Física

**Palavras-Chave:** Distribuição de fase, ruído quântico

Neste trabalho nós comparamos a distribuição de número de fons com a distribuição de fase para alguns estados do campo eletromagnético. Verifica-se nestas distribuições, como era esperado, a característica de serem estes operadores (número e fase) canônicos conjugados. Assim, pode-se obter informações sobre a distribuição de número conhecendo-se a distribuição da fase e vice-versa.

## **PROPRIEDADES ESTATÍSTICAS DO ESTADO DE NÚMERO DESLOCADO COMPRIMIDO**

Norton G. de Almeida e Célia M. A. Dantas

Universidade Federal de Goiás - Departamento de Física

**Palavras-Chave:** Estatística de fons, compressão, deslocamento

Neste trabalho nós estudamos as propriedades estatísticas do estado de número deslocado comprimido, um novo estado quântico da luz que estamos propondo. Este novo estado engloba como casos particulares alguns dos vários estados quânticos já definidos na literatura, tais como o estado de número, coerente, coerente comprimido, número comprimido, número deslocado, etc. As distribuições de número de fons e de fase deste estado são mostradas.

## TÉCNICA DE VARREDURA-Z APLICADA A MEIOS REFLETIVOS

Fernando Fuzinato Dall'Agnol e Sérgio Carlos Zilio  
IFSC (Instituto de Física de São Carlos)

*Palavras Chave:* varredura-z, análise espectral, meios refletivos

A técnica de varredura-z<sup>(1)</sup> é um método simples para medir não-linearidades com precisão. Em materiais com resposta lenta, pode-se fazer uma análise espectral do sinal<sup>(2)</sup>, que elimina efeitos lineares indesejáveis. O estudo de não-linearidades em meios refletivos através desta técnica tem por objetivo prever deformações na frente de onda de luz laser intenso, com aplicações em supercavidades. A reflexão de luz intensa em superfícies polidas traz informações das não-linearidades do meio, devido tanto a deformações superficiais, provocadas pela distribuição de temperatura, quanto à diferença de refletividade em função da variação transversal do índice de refração. Um método de varredura-z por reflexão já havia sido proposta por C. B. Araujo et al<sup>(3)</sup>. Porém nele, tem-se o inconveniente da linha de base decair segundo a função  $z^{-2}$ , devido à montagem experimental. Neste trabalho, propomos uma montagem em que a linha de base permanece 1 para sinais normalizados. Foram feitas medidas em materiais refletivos lentos. Entre os materiais estudados estão: espelhos metálicos e cristais. Realizamos medidas na superfície de cristais de rubi para verificar o sistema experimental, uma vez que estes cristais já foram amplamente investigados. Métodos computacionais iterativos que ajustam a expressão teórica, dão o mesmo valor de  $n_2$  que o medido através de outras técnicas. As medidas com espelhos metálicos, dão valores coerentes com o que é de se esperar devido a difusão de calor e do índice de refração destes materiais.

[1] M. Sheik-Bahae, A.A. Said and E.W. Stryland, *Opt. Lett.* 14, 995 (1989)

[2] C.R.Mendonça, Dissertação de mestrado, IFSC (1996)

[3] D.V.Petrov, A.S.L.Gomes and C.B.Araújo, *Appl. Phys. Lett.* 65 (9), (1994)

## PROPAGAÇÃO DE ONDAS EM MEIOS NÃO-LINEARES: O EFEITO DE DISPERSÃO DE ALTA-ORDEM

Jairo R. de Oliveira and Marco A. de Moura.

Departamento de Física - Universidade Federal de Pernambuco

*Palavras-Chave:* ondas, dispersão, não-linear, soliton

Como é bastante conhecido a propagação de pulsos ópticos em fibras é governada pela a equação não-linear de Schrödinger (ENLS). Usualmente, esta equação leva em conta a dispersão de segunda ordem (GVD) e a não-linearidade da fibra (SPM). O desenvolvimento recente de lasers e aparelhos ópticos não-lineares mostram rápido progresso na direção da obtenção de pulsos de curta duração. A teoria para o estudo de tais pulsos exige que novos efeitos sejam levados em conta e a ENLS tem então que ser estendida com a inclusão de termos adicionais tais como o intra-raman e a dispersão de terceira ordem (3OD). No estudo de pulsos ultra-curtos em fibras observamos que não somente o valor da dispersão de segunda ordem é importante mas também a sua inclinação (3OD) e curvatura, que dá origem a dispersão de quarta ordem (4OD). Especificamente na frequência  $\omega_0$  do mínimo (ou máximo) do GVD a dispersão de terceira ordem anula-se e 4OD torna-se a próxima dispersão de ordem superior. Recentemente, mostrou-se que a presença de 4OD positiva no estudo da propagação de pulsos em tais fibras sempre leva a uma perda de potência por radiação desde que o espectro do pulso estende-se no regime de dispersão normal. No caso de 4OD negativa os estudos foram feitos através de simulações numéricas por Blow, Doran e Wood (*JOSA B* 5, 38, 1988). Eles observaram que na ausência de ganho podem surgir novas estruturas de ondas solitárias. Recentemente, Karlsson e Höök (*Opt. Comm.* 104, 303, 1994) encontram analiticamente tais estruturas especuladas por Blow et al. Neste trabalho nos mostramos analiticamente a existência de outras estruturas estáveis através da introdução de condições de contorno não usuais. A conclusão mais importante da nossa solução é o fato que o pulso não irradia e apresenta a forma de um soliton ímpar com propriedades diferentes dos solitons bright e dark usuais.

(CNPq)

## SOBRE A GERAÇÃO DO INSS

*Aécio Ferreira de Lima, Basílio Baseia*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, C.P. 66318, CEP  
05389-970, São Paulo (SP)

*Vanderlei Salvador Bagnato*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, C.P. 369, CEP  
13560-970, São Carlos (SP).

*Palavras-Chave:* estados não-clássicos, estados intermediários, estatística sub-Poissoniana.

Em 1985 Stoler e colaboradores introduziram o chamado estado binomial (BS) para o campo de radiação quantizado e investigaram algumas propriedades não-clássicas exibidas por este estado, como o efeito sub-Poissoniano e compressão nas quadraturas do campo. Outra característica ressaltada por Stoler foi o fato de BS ser um estado intermediário entre o estado de número e o estado coerente. Recentemente introduzimos um estado intermediário construído a partir do BS. O novo estado, batizado de INSS, é intermediário entre o estado de número e o estado coerente-comprimido e apresenta diversas propriedades não-clássicas, à semelhança do BS. No presente trabalho propomos esquema experimental capaz de produzir INSS a partir de um dispositivo sensível à estatística do BS incidente. Observa-se que o aumento da compressão tende a atenuar o efeito sub-Poissoniano no INSS, com relação ao BS. No entanto para valores apropriados dos parâmetros interpoladores o efeito sub-Poissoniano é mais pronunciado do que aquele obtido no BS.

( CNPq, CAPES-PICD/UFPB )

## OPTICAL SQUARE-WAVE GENERATION AND CHAOTIC REGIMES FOR A COHERENTLY DRIVEN ABSORBER IN A RING CAVITY

*A. V. Ghiner, M. Matos and G. I. Surdutovich\**

Departamento de Física, UFC, Cx. P. 6030, Campus PICI, 60450-970, Fortaleza-CE  
\* also with DSIF, FEE, Unicamp, Cx. P. 6101, 13083-970, Campinas-SP

**Key-words :** Ikeda periodical instabilities.

The subject of self-pulsing in passive optical ring system under c.w. excitation has developed into an area of rapidly growing interest after Ikeda's prediction [1], by use of the numerical simulation, the periodical instabilities in the temporal dependence of the output signal. Further such periodical solutions were obtained in the models accounting the resonator round-trip delay time in differential equations. Here we put forward a concept and consider a double-periodic solution as two stable steady-state solutions in the bistability region. At this generalized map one step corresponds to two round trips of the light into the cavity. This simple idea allowed to perform numerical simulation in the framework of the habitual Poincare map technique and to determine regions of the initial conditions which are attracted to one or other steady-state solution. Even in the case of two-periodical solution these attractive regions may have multipartitude character. All simulations well performed in the model of power-law nonlinearity, with round-trip attenuation coefficient,  $k_r = k_0 + \frac{\Delta k}{1 + I^\alpha}$ , where  $I$  is the intracavity intensity of the light and the parameter  $\alpha$  defines a "strength" of the nonlinearity. According to the general analysis,  $nT$ -periodical solutions arise for  $\alpha \geq 3$  in a darkening medium ( $\Delta k < 0$ ). For  $\alpha \gg 1$  multi-periodical solutions spring up and all the picture resembles chaotic pattern.

[1] K. Ikeda, Opt. Commun. 30, 257 (1979).

(CNPq)

## SOLUÇÃO PARA O OPERADOR DENSIDADE DO SISTEMA DE DOIS ÁTOMOS RAMAN-ACOPLADOS EM INTERAÇÃO COM DOIS MODOS DO CAMPO

*José Antonio Roversi e Antonio Vidiella Barranco*

Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Departamento de Eletrônica Quântica - Caixa Postal 6165 - 13083-970 Campinas - SP.

*Palavras-Chave:* óptica quântica, interação luz-matéria, estados não-clássicos

O sistema estudado neste trabalho é o de dois átomos Raman-acoplados em interação com dois modos do campo eletromagnético. Os átomos se encontram na configuração Lambda, e o segundo nível é adiabaticamente eliminado, assumindo uma dessintonia única dos campos em relação ao nível dois muito maior do que a diferença das frequências destes dois campos. Isto nos deixa com dois átomos de dois níveis efetivos. São ressaltados os casos em que ambos os modos do campo se encontram preparados em estados binomiais ou coerentes. O ponto interessante deste problema reside no fato de termos dois modos do campo eletromagnético em estados "sintonizáveis" acoplados através de um meio atômico. Foi encontrado o operador densidade do sistema Átomos + Campos, correspondente à solução geral do problema, que permite por exemplo, o estudo da evolução da pureza de cada um dos dois campos. Isto é obtido através do cálculo do traço do operador densidade total sobre as variáveis atômicas bem como sobre as variáveis de um dos modos, o que nos fornece o operador densidade reduzido relativo ao outro modo. Investigamos a influência da variação da probabilidade característica  $p$ , que nos permite sintonizar de um estado de número ( $p=1$ ) a um estado coerente, de um dos modos, nas propriedades estatísticas do outro modo. A utilização do operador densidade neste problema também nos permite estudar o efeito de campos iniciais que não sejam estados puros.

(CNPq)

### Estado Intermediário Coerente-Coerente do Campo Luminoso

*R. A. R. Pereira, B. Baseia*  
IFUSP

*Vanderlei S. Bagnato*  
IFSC-USP

*Palavras-Chave:* estados não-clássicos, estados coerentes, superposição de estados

Nos últimos anos têm sido estudadas na literatura várias e interessantes superposições de estados do campo luminoso. Entre elas podemos citar aquelas que envolvem dois estados particulares de número,  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , e  $|0\rangle$  e  $|2\rangle$ , investigadas por Wodkiewicz et al; também aquela envolvendo dois estados coerentes particulares, por Hillery; os estados coerentes par e ímpar estudados por Gerry et al; os estados comprimidos par e ímpar por Xin et al, etc. Essas superposições de estados do campo luminoso foram extensivamente investigadas na literatura e o que são estudados são os efeitos não clássicos exibidos por tais estados, tal como estatística sub-Poissoniana, anti-agrupamento de fótons e efeito de compressão. As superposições acima citadas, envolvem dois estados do campo de radiação quantizado, diferindo de outras superposições encontradas na literatura, tal como o estado binomial, por Stoler et al, o qual interpola entre o estado de número e o estado coerente do campo de radiação, ou o estado intermediário entre o estado de número e o estado de fase, por Baseia et al, o qual interpola entre o estado de número e o (Pegg-Barnett) estado de fase. Nos dois últimos trabalhos citados, a superposição é assumida ser gerada por uma única fonte de radiação, já nos primeiros, é gerada por duas fontes de radiação. Neste trabalho estudamos a superposição generalizada de dois estados coerentes, os quais coincidem com aqueles encontrados na literatura para valores particulares de parâmetros envolvidos. Calculamos algumas propriedades relevantes que nos permite verificar a possível ocorrência de efeitos não-clássicos para o campo luminoso em tal superposição. Essas propriedades são 'plotadas' como função dos parâmetros relevantes os quais interpolam entre dois estados coerentes.

## ESTADOS PARES E ÍMPARES DE FASE

A. R. Gomes, B. Baseia  
IFUSP

Vanderlei S. Bagnato  
IFSC-USP

*Palavras-Chave:* estados não-clássicos, estados de fase, superposição de estados

Estados não-clássicos do campo luminoso quantizado, e suas diversas propriedades, têm sido intensivamente investigados nos anos recentes. Dentre eles citamos o estado de número  $|n\rangle$ , de fase (Pegg-Barnett)  $|\theta_m\rangle$ , coerente  $|\alpha\rangle$  e comprimido  $|\beta\rangle$ . Além destes casos, mais recentemente foram introduzidos na literatura alguns estados intermediários, que interpolam entre dois daqueles acima citados, tais como o estado binomial que interpola entre  $|n\rangle$  e  $|\alpha\rangle$ . Foram também propostos estados gerados por duas fontes de luz (em vez de uma), tipo  $|\psi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$ . Mais recentemente ainda, foram propostos estados pares e ímpares, de tipos especiais, tais como os estados pares-coerentes e ímpares-coerentes,  $|\psi_{\pm}(\alpha)\rangle = N_{\pm}(\alpha) [ |\alpha\rangle \pm |-\alpha\rangle ]$ , ou os estados pares-comprimidos ou ímpares-comprimidos  $|\psi_{\pm}(\beta)\rangle = N_{\pm}(\beta) [ |\beta\rangle \pm |-\beta\rangle ]$ . Estes estados exibem interessantes efeitos não-clássicos, especialmente na interação radiação-matéria. No presente trabalho, introduzimos os novos estados de fase-par e fase-ímpar, do tipo  $|\psi_{\pm}(\theta_m)\rangle = N_{\pm}(\theta_m) [ |\theta_m\rangle \pm |-\theta_m\rangle ]$ , em que  $N_{\pm}(\theta_m)$  é uma constante de normalização. Da mesma forma que  $|\psi_{\pm}(\alpha)\rangle$  eram auto-vetores do operador  $\hat{a}^2$ , e  $|\psi_{\pm}(\beta)\rangle$  eram auto-vetores de  $\hat{b}^2$ , com  $\hat{b} = (\cosh r)\hat{a} + (\sinh r)\hat{a}^\dagger$ , no caso atual  $|\psi_{\pm}(\theta_m)\rangle$  são auto-vetores do operador de fase  $\hat{\phi}_\theta$  de Pegg-Barnett. Investigamos diversas propriedades desse estado, como: ortogonalidade, normalização, distribuição estatística  $p_n$ , estatística sub-Poissoniana, anti-bunching, efeito squeezing, etc, em função dos parâmetros envolvidos. O mencionado estado exhibe oscilações na distribuição estatística  $p_n$ , efeito já observado em outros estados não-clássicos, tais como: vácuo-comprimido, número deslocado, número comprimido, etc.

## DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA DE RYDBERG EM ÁTOMOS EM CAMPOS EXTERNOS

Marcus Werner Beims

Instituto de Física, Universidade Federal do RGS - Brasil

*Palavras-chave:* Pacotes de Onda, Átomos de Rydberg, Campos Magnético e Elétrico.

O estudo da dinâmica de pacotes de onda em átomos de Rydberg através do chamado experimento de *pump-probe*, permite uma análise interessante de fenômenos que ocorrem em sistemas quânticos realísticos em função das trajetórias do correspondente sistema clássico. Neste experimento, o elétron de Rydberg é primeiramente excitado de um estado inicial com um pulso curto de laser (*pump-laser*). Então, com um segundo laser atrasado no tempo (*probe-laser*), o elétron é induzido a um estado final com emissão de um fóton. Através de uma descrição semiclassical da amplitude de transição de dois fótons utilizada para descrever este experimento, estudamos a dinâmica de pacotes de onda de Rydberg para átomos colocados em campos magnético e elétrico externos cruzados [1]. Pela possibilidade de mudança nas intensidades dos campos elétrico e magnético, este sistema apresenta uma dinâmica clássica muito rica e portanto ideal para se estudar mudanças de comportamentos clássicos sobre a dinâmica de pacotes de onda. Estes resultados permitem descrever detalhadamente em termos de trajetórias clássicas a dinâmica de pacotes de onda de Rydberg observados em experimentos [2]. Representações mais sofisticadas (chamadas de *aproximações uniformes*) da amplitude de transição são necessárias quando fenômenos clássicos de bifurcações ocorrem e demonstram que estes fenômenos são de grande relevância na dinâmica de pacotes de onda.

1. M. W. Beims, em preparação; M. W. Beims e G. Alber, Phys. Rev. A **48**, 3123 (1993).
2. L.Marmet, H.Held, G.Raithel, J.A.Yeazell and H.Walther, Phys.Rev.Lett. **72**, 3779 (1994).

(FAPERGS, CESUP-UFRGS)

## INSTABILITY IN NONLINEAR PASSIVE ABSORPTIVE OPTICAL SYSTEMS

A. V. Ghiner, M. Matos and G. I. Surdutovich\*

Departamento de Física, UFC, Cx. P. 6030, Campus PICI, 60450-970, Fortaleza-CE-Brasil

\* also with DSIF, FEE, Unicamp, Cx. P. 6101, 13083-970, Campinas-SP-Brasil

Key-words : instability, absorptive nonlinearity.

Nonlinear optics of passive ring systems exhibits a large variety of static and dynamic behaviors, such as multistable, chaotic and spatiotemporal regimes. Because of complexity of a treatment, all the considerations based on differential or finite-differential equations used some specific models of dispersive and/or absorptive nonlinearity. Since the result strongly depends on the employed model these studies do not present final conditions for origin of instability in a passive ring system under c.w. driving external excitation. Earlier we have derived analytically a set of conditions for appearance of instability in such system [1]. Here we have focused on instability that originate in passive absorptive optical ring system from the nonlinear interaction of light and matter and external feedback ( ring cavity ). In the case  $\cos \varphi_0 > k_r$ ,

criterion of instability takes form  $l \frac{dk_r}{dl} > \max \left\{ \frac{1 - k_r \cos \varphi_n}{\cos \varphi_0}, \frac{1 - 2k_r \cos \varphi_0 + k_r^2}{2(\cos \varphi_0 - k_r)} \right\}$ , where  $k_r(l)$  and

$\varphi_0 = \text{const.}$  are round-trip the amplitude coefficient and phase shift,  $l$  is the intra-cavity light intensity. By use of the Poincare map technique we checked this condition for different models of the medium nonlinearity ( $k_r(l)$  dependences) and in each case found the optimal parameters for observation of instability.

[1] A. V. Ghiner and G. I. Surdutovich, *Avtometriya*, 3, p.3 ( 1989 ).

(CNPq)

## MEDIDAS DE Z-SCAN DE NÃO-LINEARIDADES RESSONANTES : SATURAÇÃO E DEPENDÊNCIA COM A CONCENTRAÇÃO DE DOPANTE NO $\text{BaLiF}_3:\text{Ni}^{2+}$

R. E. Samad\*, N. D. Vieira Jr, S. L. Baldochi e

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CNEN/SP

Caixa Postal 11049 - Pinheiros - 05422-970 - São Paulo - SP - Brasil

S. C. Zilio

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

Caixa Postal 369, 13560-970 - São Carlos Brasil

**palavras-chave** : Z-Scan, Não-Linearidade, Saturação

O desenvolvimento de um material candidato a meio laser ativo pelo grupo, o  $\text{BaLiF}_3:\text{Ni}^{2+}$ , levou a uma necessidade de estudar o seu comportamento quando sob influência de grandes intensidades de luz laser. As características lineares do cristal, obtidas por meio de espectroscopia convencional ( seções de choque de absorção, emissão, tempos de vida, etc ) fornecem-nos elementos necessários à construção da cavidade laser, mas não esclarecem como será o comportamento do cristal quando em operação laser. A espectroscopia não-linear fornece a resposta do cristal quando submetido a altas intensidades de campos, como presente numa cavidade laser. Para realização deste estudo implantamos em nossos laboratórios o aparato necessário para determinação do índice de refração não-linear,  $n_2$ , por meio da técnica de Z-Scan modificada para absorvedores saturáveis. Esta técnica permite a discriminação da evolução temporal da não-linearidade, além de ser experimentalmente mais simples que a técnica convencional, pois elimina a necessidade de normalização por um segundo detector. Com esta técnica foram estudadas 4 amostras de  $\text{BaLiF}_3:\text{Ni}^{2+}$  com concentrações de 0,15 %, 0,30 %, 1% e 2 % em mol, sendo bombeadas continuamente por um laser de Nd:YAG oscilando em 1,064  $\mu\text{m}$ . Como resultado apresentamos a saturação da não-linearidade com a potência incidente sobre a amostra, para as diversas concentrações. Também demonstra-se, dentro do formalismo desenvolvido, que existe uma susceptibilidade não-linear de 3ª ordem, negativa, que varia linearmente com a concentração de dopante, até concentrações em torno de 2 % em mol. Para a amostra de 2 % em mol o índice de refração não-linear medido foi  $n_2 = -1.12 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{kW}$ , sob bombeio contínuo.

\*Bolsista FAPESP

Apoio projeto FAPESP 93/4999-7

## PROPAGATION OF GAUSSIAN BEAM IN A NONLINEAR LOSSY MEDIUM

*Dagoberto S. Freitas\**

Departamento de C. Exatas, Universidade Est. de F. de Santana, BA

*Jairo R. de Oliveira and Marco A. de Moura*

Departamento de Física, Universidade Federal de Pernambuco, PE

**Keyword:** nonlinear, loss, Gaussian beam

As is well known, strong beams of electromagnetic radiation propagating in a transparent medium may be subject to self-focusing as diffraction, a self-trapped mode of propagation is possible. In the theoretical treatment of these problems, much the result of a field-dependent refractive index. When the nonlinear focusing effects are balanced by the defocusing attention has been given to the variational approach. The discussion above does not consider the presence of the loss in the medium. It is well known that in real materials, the medium will not be purely transparent and the nonlinearity will not be of pure Kerr-law, but will saturate.

We investigate the propagation of cw circularly symmetric Gaussian beam in a nonlinear saturable medium with loss using a modified variational approach. We find the equations that describe the characteristics of the beam and analyze them in various regimes. In the lossless case we were able to find exact analytical solutions and determine the conditions under which solitons can be stable in two transverse dimensions. In the case of the beam propagation in a lossy medium results numerical are depicted and these results show that the presence of the dissipation affects the nonlinearity and contributes to the diffraction of the beam.

\* Instituto de Física ' Gleb Wataghin ' Universidade Est. de Campinas, Campinas, SP

( CNPq, CAPES, FINEP )

## NOVA FONTE DE ESTADOS DE DOIS FÓTONS

*A. Garuccio\* e C. H. Monken\*\**

\*Departamento di Física, Università di Bari (Itália)

\*\*Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Física, UFMG

**Palavras -Chave:** paradoxo de epr, desigualdades de bell, luminescência paramétrica

Em todos os experimentos dedicados ao teste do conceito de realismo local de Einstein Podolski e Rosen (EPR) até hoje relatados, a baixa eficiência quântica dos detectores é apontada como um dos fatores que os invalida a todos. Recentemente, Eberhard mostrou que com a utilização de estados de dois fótons com entrelaçamento assimétrico das polarizações, a eficiência quântica mínima necessária para um teste confiável pode chegar a 67%, valor praticamente disponível. Entretanto, quanto menor for a eficiência quântica, menor também será o nível máximo de contagens de fundo (background) tolerado. Quando se utiliza a luminescência paramétrica por conversão descendente, a maneira usual de se preparar o estado de dois fótons com polarizações entrelaçadas é através de um divisor de feixe, onde se misturam os dois feixes gêmeos (signal e idler) com polarizações ortogonais. Como o divisor de feixe distribui os fótons (com polarizações ortogonais) aleatoriamente, haverá casos em que ambos os fótons saem na mesma direção, contribuindo assim apenas para as contagens de fundo. A utilização de divisores de feixe na preparação dos estados de dois fótons é então incompatível com o limite mínimo de 67% de eficiência quântica. Será apresentada a proposta de Garuccio e Monken para uma nova fonte de estados de dois fótons. Nela, a preparação do estado é feita sem divisores de feixe, utilizando-se o efeito de interferência quântica entre os estados gerados por luminescência paramétrica em dois cristais não lineares com casamento de fases do tipo II. Serão apresentados os detalhes de construção da nova fonte, que deverá ser realizada no laboratório de Óptica Quântica da UFMG.

INFN, CNPq

## Measurement of Saturation Intensities by Transient Nonlinear Refraction

V.Pilla, P.R. Impinnsi and T.Catunda

Instituto de Física de São Carlos, USP, C.P. 369, 13560-970 São Carlos, S.P., Brazil, phone 016-2749199, fax 016-2713616, email: tomaz@ifqsc.sc.usp.br

In  $\text{Cr}^{+3}$  and  $\text{Nd}^{+3}$  doped solids, the nonlinearity originates from the population of dopant ion metastable state, which has a complex susceptibility different from that of ground state<sup>(1)</sup>. Z-scan is nowadays the most popular technique to measure  $n_2$  and was recently applied to ion doped solids<sup>(2)</sup>. In these materials the nonlinearity response is given by the spontaneous lifetime  $\tau_0$  (usually  $\tau_0 > 100\mu\text{s}$ .) so transient response measurements can be used in order to eliminate parasitic linear effects<sup>(1)</sup>. In present work we used a time resolved Z-scan method to determine not only  $n_2$  but also the saturation intensity  $I_s$  and (these values can be used to calculate the ground state absorption cross section  $\sigma_1$ ,  $\Delta\alpha$  and  $\Delta\sigma$ ).

Assuming that at  $t = 0$ , the laser with intensity  $I$  is turned on, from the rate equations we obtain the ion excited state population  $N_{\text{ex}} \propto N_0(1 - e^{-t/\tau}) (I/I_s)$  with  $\tau^{-1} = \tau_0^{-1} (1 + I/I_s)$ <sup>(1)</sup>. In our transient Z-scan measurements we placed the sample at either the valley or peak position ( $z = \pm 1.7z_0$ ) and measured signal transient response. By fitting our signal transient response  $\Delta T(t)$  we obtained a linear relationship between  $\tau^{-1}$  and  $I$  which allow the determination of both  $I_s$  and  $\tau_0$ . We performed measurements in ruby and alexandrite using a chopped  $\text{Ar}^+$  ion laser. The time resolved technique allowed us to distinguished these two sites and then determine  $n_2$ ,  $\tau_0$ ,  $\Delta\alpha$ ,  $\Delta\sigma$  and  $I_s$  for the  $\text{Cr}^{+3}$  ion in each kind of site.

(1) T. Catunda and L. Cury, JOSA B7,1445 (1990).

(2) L.C. Oliveira and S.C. Zilio. Appl. Phys. Lett. 65, 2121 (1994); L. C. Oliveira, T.Catunda and S.C.Zilio (to appear at Jap. J. Appl. Phys.).

## MISTURA DE DUAS ONDAS EM MEIOS COM DIFERENTES TEMPOS DE RELAXAÇÃO

J. C. Penaforte, L. C. de Oliveira, U. Freitas Neto

Departamento de Física -UFPB

C. W. Paschoal e I. Guedes

Departamento de Física - UFC

*Palavras-Chave:* m2o, interferência, relaxação

A técnica de mistura de duas ondas (M2O), consiste basicamente da interação de dois feixes de luz num dado meio material. Esta técnica tem sido uma das mais utilizadas nos últimos anos, na investigação de propriedades opticamente não-lineares, especialmente em meios denominados de absorvedores saturáveis. A interação entre dois feixes de luz laser produz uma variação espacial e periódica no índice de refração não-linear do meio. Tal interação, sob certas condições, permite a troca de energia entre os feixes. As abordagens teóricas que tratam desse fenômeno, usualmente, consideram meios materiais que possuem apenas um único mecanismo de relaxação<sup>(1)</sup>. Recentemente, foi proposto um tratamento para o processo de M2O onde se considera a presença de dois mecanismos de relaxação distintos<sup>(2)</sup>. Entretanto, esta abordagem é baseada numa extensão simples das equações convencionais, que descrevem o acoplamento entre feixes, no sentido em que o outro termo relacionado à relaxação é incluído de forma fenomenológica. Neste trabalho propomos uma abordagem alternativa, também fenomenológica, para o problema de M2O em meios com diferentes tempos de relaxação. Consideramos o modelo como sendo uma extensão da equação de Debye, de modo a incluir os dois tempos de decaimento. Foram obtidos, inicialmente para o caso analítico, as equações e soluções para o problema. A partir das soluções obtidas investigamos como se comporta a variação do parâmetro de ganho em função da intensidade de "detuning" dos feixes de luz laser.

1 - P.Yeh, IEEE J. Quantum Electron., QE-25, 484 (1989).

2 - D. Redman *et al.*, Opt. Lett., 17, 175 (1992).

## A TÉCNICA DE VARREDURA-Z RESOLVIDA EM FREQUÊNCIA

*Cleber Renato Mendonça e Sérgio Carlos Zilio*  
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

*Palavras-Chave:* técnica de varredura-z, absorvedores saturáveis, análise espectral

A técnica de Varredura-z<sup>1</sup> é uma ferramenta poderosa para a medida do índice de refração não linear de diversos materiais, porém um fator que limita a sua sensibilidade é a presença de efeitos lineares espúrios. Para absorvedores lentos, é possível fazer uma detecção do sinal resolvida no tempo<sup>2</sup> e eliminar tais efeitos, conseguindo-se desta forma a determinação de modulações de fase correspondentes a distorções da frente de onda de  $\lambda/10^4$ .

No presente trabalho, apresentamos um método baseado na análise espectral da evolução temporal da transmitância, quando um feixe laser é modulado numa frequência  $f$ . As componentes de Fourier da evolução temporal da transmitância em  $f$  e  $2f$  estão respectivamente relacionadas com os efeitos lineares e não-lineares e sua razão pode ser usada na eliminação de efeitos lineares. Este método, denominado Varredura-z resolvida em frequência, permite um aumento significativo na sensibilidade da técnica de Varredura-z em medidas de absorvedores lentos. Tal método se combinada com "EZ-scan"<sup>3</sup> permite medidas de modulação de fase correspondentes a distorções da frente de onda de  $\lambda/10^5$ .

A aplicabilidade bem como a sensibilidade desta técnica foram demonstradas em medidas realizadas em absorvedores lentos, especificamente o Rubi e o Aluminato de Gadolinio. Tais materiais são convenientes para estes fins pois já tiveram suas não-linearidades investigadas anteriormente por diversos métodos. Discutimos também a possibilidade de extensão desse método para meios transparentes rápidos.

1) M. Sheik-Bahae, A. A. Said and W. Van Stryland, Opt. Lett. 14, 995 (1989)

2) L. C. Oliveira and S.C.Zilio, Appl. Phys. Lett. 65 (17), 1994

3) T. Xia, D. J. Hagan, M. Sheik-Bahae and W. Van Stryland, Opt. Lett. 19, 317 (1994)

# Índice de Autores e Apresentações

## Períodos

- 1 - Primeiro Período da Manhã  
2 - Segundo Período da Manhã  
3 - Painéis

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Abbate, M.	3	3	Real	168	Almeida, E. F.	4	1	2	237
Abbate, M.	5	1	4	471	Almeida, E. F.	4	1	2	239
Abbate, M.	3	3	Real	193	Almeida, E. F.	5	3	Real	578
Abbate, M.	3	3	Real	195	Almeida, M. P.	3	2	3	57
Abbate, M.	3	3	Real	197	Almeida, N. G.	5	3	Real	645
Abbate, M.	3	3	Real	182	Almeida, N. S.	4	3	Real	337
Abranof, E.	3	3	Real	157	Almeida, N. S.	5	2	4	497
Abreu, J. A. M.	3	2	6	52	Almeida, N. S.	4	2	7	264
Achete, C. A.	3	3	Real	202	Almeida, R. M. C.	5	3	Real	518
Achete, C. A.	3	3	Real	205	Almeida, R. M. C.	5	3	Real	519
Achete, C. A.	3	1	4	36	Alonso, A.	3	3	Real	76
Achete, C. A.	5	1	4	473	Alves Junior, N.	4	3	Real	324
Achete, C. A.	3	3	Real	196	Alves Junior, N.	5	3	Real	536
Acioli, L. H.	3	2	Topazio	64	Alves, A. R.	4	3	Real	367
Acioli, L. H.	5	2	6	490	Alves, A. R.	4	3	Real	381
Acioli, P. H.	5	2	4	497	Alves, A. S.	5	2	Topazio	499
Acioli, P. H.	4	3	Real	296	Alves, A. S.	3	3	Real	165
Acioli, P. H.	5	1	5	440	Alves, A. S.	5	3	Real	607
Aguiar, F. M.	4	1	7	231	Alves, D.	5	3	Real	520
Aguiar, F. M.	4	1	7	231	Alves, E. S.	3	3	Real	148
Aguiar, F. M.	4	3	Real	333	Alves, H. W. L.	5	1	Imperial	458
Aguiar, F. M.	4	3	Real	336	Alves, H. W. L.	5	3	Real	605
Aguiar, F. M.	4	3	Real	338	Alves, H. W. L.	4	3	Real	386
Aguiar, F. M.	4	3	Real	326	Alves, J. L. A.	5	1	Imperial	458
Aguiar, J. A. O.	4	1	9	253	Alves, K. M. B.	5	3	Real	576
Aguiar, J. A. O.	4	3	Real	416	Alves, K. M. B.	5	3	Real	550
Aguiar, J. A. O.	3	3	Real	186	Alves, L. M.	5	3	Real	601
Aguiar, M. C. O.	3	3	Real	210	Alves, M. C. M.	4	3	Real	346
Albuquerque, A. S.	5	3	Real	557	Alves, M. V.	5	3	Real	527
Albuquerque, C. J. M.	4	3	Real	421	Alves, N.	5	3	Real	614
Albuquerque, D. F.	4	3	Real	319	Alves, O. C.	3	3	Real	80
Albuquerque, D. F.	3	3	Real	118	Alves, S. G.	5	2	Rubi	479
Albuquerque, J. E.	3	1	2	30	Alves, S. G.	5	3	Real	511
Albuquerque, M. P.	5	3	Real	536	Amaral, L.	4	3	Real	360
Albuquerque, M. P.	4	2	7	265	Amaral, L.	3	2	4	61
Alcaraz, F. C.	4	3	Real	320	Amaral, L.	3	2	4	61
Alcaraz, F. C.	3	2	Safira	47	Amaral, L.	4	3	Real	351
Alencar, A. M.	5	3	Real	599	Amaral, L. Q.	3	3	Real	74
Algatti, M. A.	3	2	2	59	Amaral, L. Q.	3	3	Real	170
Algatti, M. A.	5	3	Real	636	Amaral, L. Q.	3	3	Real	73
Algatti, M. A.	4	3	Real	392	Amaral, L. Q.	4	1	8	250
Algatti, M. A.	4	3	Real	396	Amaral, O. A. V.	4	3	Real	299
Algatti, M. A.	4	3	Real	396	Amorim, C. E. S.	3	2	2	59
Almeida, A. P.	3	3	Real	204	Amorim, M. C. L.	3	3	Real	78
Almeida, D. P.	3	1	5	4	Anda, E. V.	3	3	Real	151

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Anda, E. V.	4	3	Real .....	367	Avila, M. A.	3	3	Real .....	186
Anda, E. V.	3	1	6 .....	19	Avila, M. A.	3	3	Real .....	189
Anda, E. V.	3	3	Real .....	110	Awana, V. P. S.	4	1	9 .....	253
Anda, E. V.	3	3	Real .....	150	Awana, V. P. S.	4	3	Real .....	416
Anda, E. V.	3	3	Real .....	149	Ayta, W. E. F.	3	3	Real .....	126
Andrade Junior, J. S.	4	2	8 .....	275	Ayta, W. E. F.	3	3	Real .....	132
Andrade Junior, J. S.	4	3	Real .....	403	Azevedo, G. M.	5	3	Real .....	640
Andrade Junior, R.	4	1	9 .....	251	Azevedo, S. A. F.	4	2	6 .....	268
Andrade Junior, R.	3	3	Real .....	185	Bacchieri, A.	5	3	Real .....	631
Andrade Neto, A. S.	4	3	Real .....	299	Baesso, M. L.	5	3	Real .....	611
Andrade Neto, M. A.	5	3	Real .....	597	Baesso, M. L.	3	1	3 .....	27
Andrade, A. V. C.	5	2	8 .....	487	Baia Neto, A. L.	3	1	4 .....	37
Andrade, L. H. C.	3	3	Real .....	126	Baibich, M. N.	4	3	Real .....	327
Andrade, L. H. F.	3	3	Real .....	168	Baibich, M. N.	4	3	Real .....	331
Andrade, R. F. S.	5	3	Real .....	574	Baibich, M. N.	5	3	Real .....	641
Andrade, R. F. S.	5	1	Safira.....	441	Baibich, M. N.	4	3	Real .....	329
Andreeta, M. R. B.	4	1	6 .....	241	Baibich, M. N.	5	1	7 .....	445
Andreeta, M. R. B.	4	1	6 .....	243	Baibich, M. N.	3	2	4 .....	62
Andreeta, M. R. B.	3	2	Topazio.....	63	Baierle, R. J.	5	3	Real .....	590
Anjos, V. C.	4	3	Real .....	369	Baierle, R. J.	5	3	Real .....	591
Anteneodo, C. B.	3	3	Real .....	71	Bakuzis, A. F.	5	3	Real .....	609
Anteneodo, C. B.	5	3	Real .....	504	Bakuzis, A. F.	3	2	3 .....	56
Anteneodo, C. B.	3	1	Safira.....	7	Baldan, M. R.	5	3	Real .....	540
Antunes, A. B.	4	3	Real .....	327	Baldochi, S. L.	5	3	Real .....	650
Antunes, A. B.	4	3	Real .....	331	Baldochi, S. L.	3	3	Real .....	120
Anyele, H. T.	4	2	Imperial....	273	Baldochi, S. L.	5	3	Real .....	589
Anyele, H. T.	3	3	Real .....	149	Baldochi, S. L.	3	3	Real .....	131
Anyele, H. T.	5	2	4 .....	498	Balzuweit, K.	5	3	Real .....	586
Aquere Filho, K.	5	3	Real .....	518	Balzuweit, K.	4	3	Real .....	341
Aranha, N.	4	3	Real .....	350	Baran, Z.	4	3	Real .....	360
Aranha, N.	4	3	Real .....	352	Baran, Z.	4	3	Real .....	358
Aranha, N.	3	3	Real .....	212	Baraviera, A. T.	5	3	Real .....	503
Aranha, N.	3	2	6 .....	53	Barbato, D. M. L.	5	3	Real .....	512
Aranha, N.	4	2	2 .....	271	Barbatti, M. C.	3	3	Real .....	88
Aranha, N.	3	3	Real .....	215	Barbieri, R. S.	3	3	Real .....	91
Aranha, N.	5	1	6 .....	451	Barbosa Filho, F. F.	4	3	Real .....	324
Araujo, A. D.	5	3	Real .....	530	Barbosa, F. R.	5	2	Topazio.....	501
Araujo, E. B.	4	2	2 .....	272	Barbosa, F. R.	3	3	Real .....	211
Araujo, E. B.	5	3	Real .....	634	Barbosa, G. A.	3	1	Topazio.....	40
Araujo, J. F.	4	1	2 .....	240	Barbosa, K. O.	5	3	Real .....	594
Araujo, J. H.	4	3	Real .....	355	Barbosa, L. C.	4	3	Real .....	378
Araujo, M. T.	5	3	Real .....	523	Barbosa, L. C.	4	3	Real .....	384
Araujo, M. T.	5	1	6 .....	452	Barbosa, L. C.	4	3	Real .....	363
Araujo, M. T.	3	1	Topazio.....	38	Barbosa, L. C.	4	3	Real .....	350
Araujo, R. C.	5	3	Real .....	556	Barbosa, L. C.	4	3	Real .....	352
Araujo, R. E.	3	1	Topazio.....	38	Barbosa, L. C.	3	3	Real .....	212
Arias, A. C.	5	3	Real .....	628	Barbosa, L. C.	3	3	Real .....	210
Aristone, F.	4	3	Real .....	365	Barbosa, L. C.	3	1	Imperial....	22
Arruda, A. S.	4	3	Real .....	308	Barbosa, L. C.	3	2	6 .....	53
Arzua, A.	3	3	Real .....	137	Barbosa, L. C.	4	2	2 .....	271
Attili, R. N.	5	3	Real .....	564	Barbosa, L. C.	3	3	Real .....	215
Attili, R. N.	3	3	Real .....	128	Barbosa, L. C.	5	1	6 .....	451
Auler, L. T. S.	5	1	6 .....	450	Barbosa, L. C.	3	1	Imperial....	23
Auler, L. T. S.	4	3	Real .....	397	Barbosa, L. C.	3	2	6 .....	53
Avanci, L. H.	3	3	Real .....	140	Barbosa, M. C. B.	5	2	2 .....	495
Avila, M. A.	4	1	9 .....	251	Barbosa, M. C. B.	4	3	Real .....	404

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Barbosa, M. C. B.	4	3	Real .....	404	Bezerra Junior, A. G.	3	3	Real .....	177
Barbosa, M. S.	5	1	5 .....	440	Bezerra, C. A. C. A.	3	2	6 .....	52
Barbosa, P. L. M.	5	1	3 .....	463	Bezerra, E. F.	4	1	2 .....	237
Barbosa, P. L. M.	5	2	3 .....	494	Bezerra, E. F.	4	1	2 .....	238
Barbosa, P. L. M.	3	1	3 .....	25	Bianchi, I.	3	3	Real .....	188
Bariani, N. M. V.	3	3	Real .....	207	Bianchi, R. F.	5	3	Real .....	616
Barja, P. R.	3	3	Real .....	81	Biasi, R. S.	4	3	Real .....	355
Barja, P. R.	3	3	Real .....	68	Bindilatti, V.	3	1	Imperial....	23
Barone, P. M. V. B.	3	1	Rubi.....	2	Bindilatti, V.	4	3	Real .....	328
Barone, P. M. V. B.	3	1	Rubi.....	3	Bindilatti, V.	4	3	Real .....	337
Barranco, A. V.	3	1	Topazio....	42	Bindilatti, V.	4	3	Real .....	414
Barrio, J. B. M.	5	1	8 .....	449	Bindilatti, V.	4	3	Real .....	414
Barros, F. S.	4	2	Rubi.....	259	Biondo Filho, A.	5	3	Real .....	576
Barros, F. S.	4	2	Rubi.....	258	Biondo Filho, A.	5	3	Real .....	550
Barros, R. C. M. D.	3	3	Real .....	204	Bisch, P. M.	5	3	Real .....	507
Barthen, R. B.	4	3	Real .....	422	Bisch, P. M.	5	3	Real .....	502
Barthen, R. B.	3	3	Real .....	130	Bisch, P. M.	3	3	Real .....	78
Bartra, W. E. L.	5	1	6 .....	452	Bisch, P. M.	3	3	Real .....	71
Bassi, D.	4	3	Real .....	302	Bisch, P. M.	5	3	Real .....	504
Basso, H. C.	3	3	Real .....	132	Bisch, P. M.	3	3	Real .....	84
Basso, H. C.	5	3	Real .....	568	Bisch, P. M.	3	3	Real .....	83
Basso, H. C.	4	3	Real .....	420	Bisch, P. M.	3	1	Rubi.....	1
Basso, H. C.	3	3	Real .....	127	Bonardi, C.	3	3	Real .....	176
Bassora, L. A.	5	3	Real .....	579	Borelli, M. E. S.	4	3	Real .....	399
Bassrei, A.	5	3	Real .....	540	Borelli, M. E. S.	5	3	Real .....	503
Bassrei, A.	5	3	Real .....	547	Borges Junior, I.	3	1	5 .....	4
Bassrei, A.	4	3	Real .....	422	Borges, A. N.	4	3	Real .....	366
Batista, J. A.	3	3	Real .....	154	Borges, A. N.	4	3	Real .....	364
Batista, W. O. G.	4	3	Real .....	360	Borges, A. N.	5	3	Real .....	596
Batista, W. O. G.	4	3	Real .....	358	Borissevitch, G.	3	3	Real .....	83
Beatrice, C. R. S.	5	3	Real .....	566	Borissevitch, G.	3	3	Real .....	84
Beatrice, C. R. S.	5	3	Real .....	566	Borissevitch, I.	3	3	Real .....	83
Becerra, C. C.	5	2	7 .....	483	Borissevitch, I.	4	1	Rubi.....	224
Becerra, C. C.	5	2	7 .....	483	Borissevitch, I.	3	3	Real .....	77
Becerra, C. C.	4	3	Real .....	414	Bortoleto, J. R. R.	4	3	Real .....	396
Becerra, C. C.	4	3	Real .....	414	Bosquetti, D.	3	3	Real .....	153
Beims, M. W.	3	3	Real .....	96	Bosquetti, D.	4	3	Real .....	375
Beims, M. W.	5	3	Real .....	649	Bosquetti, D.	4	3	Real .....	382
Bell, M. J. V.	4	3	Real .....	361	Bozano, D. F.	5	3	Real .....	627
Belo, L. C. M.	3	1	3 .....	25	Bozano, D. F.	5	3	Real .....	624
Beloto, A. F.	3	3	Real .....	158	Bozano, D. F.	5	3	Real .....	588
Benatti, C. R.	3	3	Real .....	76	Bozano, D. F.	4	3	Real .....	350
Benevides, C. A.	5	3	Real .....	523	Braga, G. C. B.	3	3	Real .....	183
Bento, A. C.	3	3	Real .....	194	Braggion, L.	4	3	Real .....	300
Bento, A. C.	3	1	3 .....	27	Branco, N. S.	4	3	Real .....	319
Bernardes Filho, R.	3	3	Real .....	66	Brasil, M. J. S. P.	4	1	Imperial....	246
Bernardes, A. T.	3	1	Rubi.....	2	Brito, A. N.	5	3	Real .....	525
Bernardes, A. T.	5	2	Rubi.....	478	Brito, A. N.	3	3	Real .....	90
Bernardes, A. T.	3	1	Safira.....	8	Brito, A. N.	5	3	Real .....	533
Bernardes, L. A. B.	5	2	7 .....	484	Brito, A. N.	5	3	Real .....	533
Bernussi, A. A.	4	1	Imperial....	245	Brito, P. E.	3	3	Real .....	100
Bernussi, A. A.	4	1	Imperial....	246	Brito, P. E.	3	3	Real .....	149
Bernussi, A. A.	5	2	Imperial....	491	Brito, V. P.	4	3	Real .....	313
Bernussi, A. A.	4	1	Topazio....	257	Bruckmann, M. E.	4	3	Real .....	351
Bernussi, A. A.	4	1	Topazio....	255	Brumatto, H. J.	5	2	7 .....	483
Bettini, J.	3	1	Imperial....	21	Brum, J. A.	4	1	Imperial....	245

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Brum, J. A.	4	3	Real .....	385	Cardoso, L. P.	3	3	Real .....	167
Brum, J. A.	4	1	Imperial...	246	Cardoso, L. P.	3	3	Real .....	140
Brum, J. A.	4	3	Real .....	370	Carneiro, A. A. O.	4	3	Real .....	419
Brum, J. A.	4	3	Real .....	383	Carneiro, A. A. O.	4	3	Real .....	348
Brunetto, S. Q.	3	2	Rubi.....	44	Carneiro, C. E. I.	4	3	Real .....	320
Brunetto, S. Q.	3	2	Rubi.....	43	Carneiro, C. E. I.	4	3	Real .....	399
Brunnet, L. G.	5	1	Safira.....	442	Carneiro, G. N.	4	3	Real .....	372
Bruno, A. C. O.	5	3	Real .....	556	Carreira, M. C.	4	3	Real .....	289
Bruno, A. C. O.	3	3	Real .....	115	Carreno, M. N. P.	4	2	4 .....	277
Bruno, A. C. O.	4	3	Real .....	283	Carreno, M. N. P.	3	1	4 .....	37
Bruno, A. C. O.	4	3	Real .....	282	Carreno, M. N. P.	5	3	Real .....	633
Bruno, O. M.	4	3	Real .....	394	Carrico, A. S.	4	3	Real .....	336
Bugs, M. R.	4	3	Real .....	285	Carrico, A. S.	4	2	7 .....	264
Burger, R.	3	3	Real .....	86	Carrico, A. S.	3	1	7 .....	13
Cabral, F. A. O.	5	3	Real .....	553	Carrico, A. S.	4	3	Real .....	327
Cabral, F. A. O.	5	3	Real .....	554	Carrio, J. A. G.	4	3	Real .....	359
Cabral, F. A. O.	5	3	Real .....	556	Carvalho Junior, W.	3	1	Imperial...	21
Cadilhe, M. W.	3	3	Real .....	92	Carvalho Junior, W.	3	3	Real .....	165
Caetano, E. P.	4	3	Real .....	330	Carvalho Junior, W.	3	3	Real .....	164
Caetano, R. C.	3	3	Real .....	78	Carvalho Junior, W.	3	3	Real .....	163
Caliri, A.	5	3	Real .....	519	Carvalho Junior, W.	5	2	Imperial...	492
Caliri, A.	4	3	Real .....	402	Carvalho, C. A. M.	5	3	Real .....	600
Caliri, A.	4	3	Real .....	406	Carvalho, C. L.	3	3	Real .....	188
Campanha, J. R.	3	3	Real .....	145	Carvalho, C. L.	3	3	Real .....	184
Campo Junior, V. L.	3	3	Real .....	143	Carvalho, C. R. C.	4	3	Real .....	303
Campo Junior, V. L.	4	3	Real .....	372	Carvalho, I. C. S.	5	1	6 .....	450
Campos, C. S.	5	3	Real .....	629	Carvalho, I. C. S.	5	1	6 .....	451
Campos, J. B.	5	3	Real .....	622	Carvalho, I. C. S.	3	2	Topazio....	64
Cancela, L. S. G.	4	1	2 .....	238	Carvalho, I. L.	3	1	5 .....	6
Candela, D. R. S.	4	3	Real .....	410	Carvalho, J. F.	5	3	Real .....	588
Candela, D. R. S.	4	3	Real .....	417	Carvalho, J. F.	5	3	Real .....	587
Cannas, S. A.	4	3	Real .....	316	Carvalho, J. F.	4	3	Real .....	433
Cansian, A. M.	4	3	Real .....	432	Carvalho, J. X.	4	3	Real .....	316
Canuto, S. R. A.	4	3	Real .....	303	Carvalho, M. A. G.	5	3	Real .....	569
Canuto, S. R. A.	4	3	Real .....	299	Carvalho, M. C.	4	3	Real .....	423
Canuto, S. R. A.	5	2	8 .....	486	Carvalho, M. C.	4	3	Real .....	425
Canuto, S. R. A.	5	1	5 .....	439	Carvalho, R. P.	3	3	Real .....	80
Canuto, S. R. A.	4	3	Real .....	302	Carvalho, V. E.	3	3	Real .....	191
Canuto, S. R. A.	4	3	Real .....	305	Carvalho, V. E.	4	3	Real .....	338
Canuto, S. R. A.	5	3	Real .....	607	Cascante, F. E. A.	4	1	Rubi.....	223
Caparica, A. A.	5	3	Real .....	569	Cascante, F. E. A.	5	3	Real .....	525
Caparica, A. A.	5	3	Real .....	596	Cassiano, M. M.	5	3	Real .....	507
Caparica, A. A.	4	3	Real .....	343	Cassol, A. S.	5	3	Real .....	522
Capaz, R. B.	5	1	Imperial...	458	Cassol, A. S.	3	3	Real .....	197
Capelli, M. R.	3	3	Real .....	121	Castillo, C. M. C.	3	3	Real .....	192
Carara, M. A.	5	1	7 .....	444	Castillo, I. A.	3	1	9 .....	33
Carballo, J. M.	4	3	Real .....	413	Castillo, I. A.	4	1	9 .....	252
Carbonari, A. W.	3	3	Real .....	127	Castillo, I. A.	3	3	Real .....	189
Carbonari, A. W.	5	3	Real .....	552	Castillo, I. A.	3	1	9 .....	34
Carbonari, A. W.	5	3	Real .....	560	Castineira, J. L. P.	5	3	Real .....	593
Carbonari, A. W.	5	3	Real .....	578	Castro, A. C.	3	3	Real .....	88
Cardona, P. S. P.	4	1	5 .....	227	Castro, A. R. B.	4	3	Real .....	431
Cardoso, C. A.	4	1	9 .....	251	Castro, A. R. B.	5	3	Real .....	531
Cardoso, C. A.	3	3	Real .....	189	Castro, A. R. B.	4	3	Real .....	347
Cardoso, F. C.	5	1	3 .....	464	Castro, J. D.	4	3	Real .....	331
Cardoso, L. P.	3	2	8 .....	50	Castro, J. D.	3	1	7 .....	12

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Castro, J. D.	4	2	7	265	Coelho, A. A.	5	3	Real	558
Castro, M. A.	4	3	Real	304	Coelho, F. O.	3	3	Real	104
Castro, M. A.	4	3	Real	299	Coelho, L. F. S.	3	3	Real	92
Castro, S. G. C.	5	3	Real	633	Cohenca, C. H.	5	3	Real	585
Castro, S. G. C.	5	3	Real	626	Coimbra, D.	3	3	Real	91
Castro, S. G. C.	3	3	Real	198	Colombo, M. F.	3	3	Real	67
Castro, S. G. C.	5	1	4	470	Colombo, M. F.	3	3	Real	78
Castro, S. G. C.	5	3	Real	636	Colussi, V. C.	4	3	Real	432
Castro, T. T. M.	4	3	Real	323	Colussi, V. C.	5	1	Rubi	435
Castro, T. T. M.	3	3	Real	104	Comedi, D. M.	5	3	Real	627
Castro, T. T. M.	3	3	Real	102	Comedi, D. M.	5	3	Real	593
Catalani, F.	5	2	5	482	Comedi, D. M.	3	1	8	15
Cavalcante, E. M.	5	3	Real	620	Continentino, M. A.	5	3	Real	534
Cavalcanti, L. P.	3	3	Real	135	Continentino, M. A.	3	3	Real	111
Cavalcanti, S. B.	3	3	Real	210	Continentino, M. A.	5	3	Real	537
Cavalcanti, S. B.	5	3	Real	546	Cordeiro, C. E.	4	3	Real	411
Cavalli, A.	3	3	Real	84	Correa Filho, J. A.	5	3	Real	595
Celaschi, S.	3	3	Real	212	Correa Filho, J. A.	5	3	Real	595
Celaschi, S.	3	2	Topazio	63	Correa Junior, C.	3	3	Real	109
Cella, N.	3	3	Real	207	Correa, A. C.	5	3	Real	510
Cerdeira, F.	3	1	Imperial	24	Correa, G. E. M.	5	1	2	460
Cerdeira, F.	4	3	Real	390	Costa Filho, A. J.	3	3	Real	73
Cerdeira, F.	4	3	Real	384	Costa Filho, A. J.	3	3	Real	79
Cesar, C. L.	4	3	Real	378	Costa, A. A.	4	1	7	231
Cesar, C. L.	4	3	Real	384	Costa, A. A.	4	1	7	231
Cesar, C. L.	4	3	Real	363	Costa, A. A.	4	3	Real	333
Cesar, C. L.	4	2	Topazio	279	Costa, A. A.	4	3	Real	336
Cesar, C. L.	5	3	Real	524	Costa, A. C. R.	3	3	Real	136
Cesar, C. L.	3	3	Real	210	Costa, E. J. X.	5	3	Real	514
Cesar, C. L.	5	1	6	451	Costa, F. A.	5	1	Safira	443
Cesar, C. L.	5	2	Rubi	480	Costa, F. A.	5	3	Real	537
Cesar, C. L.	5	2	Rubi	480	Costa, G. A.	4	3	Real	297
Cesar, C. L.	3	1	Imperial	23	Costa, I. F.	4	1	Imperial	246
Cescato, L. H. D.	4	3	Real	430	Costa, I. F.	4	3	Real	370
Cescato, L. H. D.	5	1	Topazio	477	Costa, I. F.	4	3	Real	383
Cescato, L. H. D.	3	3	Real	193	Costa, L. S.	5	3	Real	533
Cezar, J. C.	4	2	3	266	Costa, L. S.	5	3	Real	532
Cezar, J. C.	4	3	Real	348	Costa, L. S.	5	3	Real	532
Chachan, H.	5	3	Real	602	Costa, M. F.	4	3	Real	304
Chachan, H.	5	1	Imperial	459	Costa, M. H. A. S.	5	3	Real	539
Chahine, J.	5	3	Real	509	Costa, M. M.	5	3	Real	616
Chalub, F. A. C. C.	4	3	Real	400	Costa, M. M.	5	3	Real	620
Chattah, A. K.	5	3	Real	545	Costa, M. V. T.	3	1	7	12
Chaves Junior, J. C.	5	3	Real	506	Costa, M. V. T.	3	1	7	10
Chaves, C. M. G. F.	4	1	Safira	230	Costa, M. V. T.	3	3	Real	116
Chemello, V.	4	3	Real	286	Costa, M. V. T.	4	3	Real	331
Chinaglia, E. F.	4	1	7	233	Costa, R. M.	3	1	9	34
Chinaglia, E. F.	4	1	7	233	Costa, R. M.	3	1	9	33
Chitta, V. A.	4	1	Imperial	247	Costa, S. C.	5	3	Real	539
Christensen, K.	5	1	Safira	441	Costa, U. M. S.	3	1	Safira	9
Chubaci, J. F. D.	5	3	Real	638	Costa, U. M. S.	4	3	Real	309
Chubaci, J. F. D.	3	3	Real	201	Costa, U. M. S.	4	3	Real	309
Coaquira, J. A. II.	5	3	Real	555	Cotta, M. A.	5	1	4	473
Coelho Neto, J. A.	5	3	Real	581	Cotta, M. A.	3	3	Real	192
Coelho Neto, J. A.	4	1	3	235	Courrol, L. C.	3	3	Real	209
Coelho, A. A.	5	3	Real	553	Coutinho Filho, M. D.	4	3	Real	409

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Coutinho Filho, M. D.	4	1	Safira.....	228	Dahmouche, K.	4	3	Real .....	395
Coutinho, K. R.	5	1	5 .....	439	Dall'agnol, F. F.	5	3	Real .....	646
Coutinho, K. R.	4	3	Real .....	305	Damiao, A. J.	4	3	Real .....	424
Coutinho, S. G.	4	3	Real .....	325	Damiao, A. J.	5	3	Real .....	589
Coutinho, S. G.	5	3	Real .....	537	Dantas, A. L.	4	3	Real .....	336
Coutinho, S. G.	4	3	Real .....	310	Dantas, A. L. L.	5	3	Real .....	611
Craco, L.	3	1	7 .....	11	Dantas, C. M. A.	5	3	Real .....	645
Craievich, A. F.	3	1	Imperial....	22	Dantas, C. M. A.	5	3	Real .....	645
Craievich, A. F.	4	1	6 .....	243	Dantas, N. O.	3	3	Real .....	161
Craievich, A. F.	4	2	3 .....	267	Dantas, N. O.	4	3	Real .....	349
Craievich, A. F.	4	3	Real .....	349	Dantas, N. O.	4	3	Real .....	345
Cressoni, J. C.	5	3	Real .....	543	Dantas, N. O.	4	3	Real .....	363
Cressoni, J. C.	4	3	Real .....	323	Dantas, N. O.	4	3	Real .....	352
Cretelli, N. B. S.	3	3	Real .....	75	Dantas, N. O.	4	3	Real .....	352
Crivelenti, V. L.	3	3	Real .....	140	Dantas, N. S.	5	3	Real .....	607
Crivelenti, V. L.	5	1	8 .....	455	Dardenne, L. E.	4	3	Real .....	298
Crivelenti, V. L.	3	3	Real .....	199	Davidovich, M. A. M.	3	3	Real .....	150
Cruvinel, P. E.	5	3	Real .....	507	Davidovich, M. A. M.	3	3	Real .....	150
Cruvinel, P. E.	5	2	5 .....	481	Dawson, K.	4	3	Real .....	405
Cruvinel, P. E.	3	3	Real .....	95	Demencis, L. S.	5	1	2 .....	461
Cruz, F. A. O.	5	3	Real .....	510	Depeyrot, J.	4	3	Real .....	374
Cruz, F. A. O.	5	3	Real .....	505	Depeyrot, J.	3	3	Real .....	144
Cruz, F. C.	3	3	Real .....	208	Destro, M. G.	3	2	5 .....	45
Cruz, F. C.	4	1	Topazio....	254	Destro, M. G.	3	3	Real .....	219
Cruz, F. C.	4	1	Topazio....	254	Dias, C. L.	3	3	Real .....	173
Cruz, G. K.	4	3	Real .....	420	Dias, J. A.	4	3	Real .....	294
Cruz, H. R.	4	3	Real .....	309	Diehl, A.	4	3	Real .....	404
Cruz, J. M. R.	3	3	Real .....	166	Dirani, E. A. T.	5	3	Real .....	628
Cruz, S. M. H. O.	4	3	Real .....	393	Dirani, E. A. T.	5	3	Real .....	642
Cuffini, S. L.	4	3	Real .....	359	Domingos, R. C.	3	2	2 .....	59
Cuffini, S. L.	4	1	6 .....	243	Domingos, R. C.	4	3	Real .....	392
Cunha, A. G.	3	3	Real .....	187	Dorneles, L. S.	4	3	Real .....	335
Cunha, C. R. M.	4	3	Real .....	302	Dorneles, L. S.	4	3	Real .....	332
Cunha, J. B. M.	5	3	Real .....	553	Dumelow, T.	5	3	Real .....	554
Cunha, J. B. M.	5	3	Real .....	560	Dumelow, T.	4	3	Real .....	329
Cunha, J. B. M.	3	1	7 .....	13	Dupouy, B. K.	4	3	Real .....	392
Cunha, J. B. M.	3	1	8 .....	14	Dupouy, B. K.	4	3	Real .....	396
Curado, E. M. F.	3	1	Safira.....	7	Durrant, S. F.	5	3	Real .....	634
Curilef, S.	5	3	Real .....	599	Durrant, S. F.	5	3	Real .....	633
Curilef, S.	5	3	Real .....	538	Durrant, S. F.	3	3	Real .....	183
Cury, L. A.	4	3	Real .....	367	Durrant, S. F.	5	3	Real .....	632
Cury, L. A.	4	3	Real .....	381	Durrant, S. F.	5	3	Real .....	626
Cury, L. A.	4	1	Imperial....	245	Dutra, S. M.	3	1	Topazio....	41
Cury, L. A.	3	3	Real .....	142	Dytz, A. S.	4	3	Real .....	290
Cury, L. A.	4	3	Real .....	380	Dytz, A. S.	4	3	Real .....	287
Cusatis, C.	4	2	3 .....	266	Eltom, A. E.	4	1	9 .....	252
Custodio, M. C. C.	4	1	6 .....	242	Enderlein, R.	5	3	Real .....	593
D'aguair Neto, M. M. F.	3	3	Real .....	136	Enderlein, R.	4	3	Real .....	363
D'ajello, P. C. T.	5	3	Real .....	630	Enderlein, R.	4	3	Real .....	388
D'ajello, P. C. T.	5	3	Real .....	635	Enderlein, R.	3	3	Real .....	162
D'ajello, P. C. T.	5	3	Real .....	642	Enderlein, R.	4	3	Real .....	381
D'almeida, F. M. R.	4	3	Real .....	417	Enderlein, R.	4	3	Real .....	376
D'almeida, F. M. R.	4	3	Real .....	416	Enderlein, R.	4	3	Real .....	376
D'incao, J. P.	4	3	Real .....	301	Enderlein, R.	4	3	Real .....	376
Dacal, L. C. O.	3	3	Real .....	155	Enderlein, R.	4	3	Real .....	375
Dahmouche, K.	5	3	Real .....	616	Enderlein, R.	5	1	Imperial....	456
					Enderlein, R.	4	3	Real .....	378
					Escote, M. T.	3	3	Real .....	121

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Esperidiao, A. S. C.	3	3	Real .....	145	Feitosa, C. C. A.	4	3	Real .....	338
Espinoza, J. L. U.	3	3	Real .....	162	Feitosa, C. C. A.	4	3	Real .....	326
Espinoza, W. A. A.	4	3	Real .....	363	Feitosa, E. S.	3	3	Real .....	67
Esquivez, D. M. S.	4	3	Real .....	284	Felicio, J. R. D.	3	2	Safira.....	48
Esquivez, D. M. S.	4	3	Real .....	283	Felicio, J. R. D.	5	3	Real .....	544
Esteves, J. S.	5	3	Real .....	570	Felicio, J. R. D.	4	3	Real .....	322
Evangelista, L. R.	5	1	3 .....	466	Felicio, J. R. D.	3	3	Real .....	102
Evangelista, L. R.	3	1	3 .....	27	Fellows, C. E.	5	1	5 .....	438
Fabbri, M.	5	3	Real .....	586	Ferlauto, A. S.	3	3	Real .....	152
Facin, P. C.	5	2	7 .....	484	Fernandes, A. A. R.	4	3	Real .....	332
Fantini, M. C. A.	4	2	4 .....	277	Fernandes, M. C. B.	4	3	Real .....	301
Fantini, M. C. A.	5	3	Real .....	636	Fernandes, M. G.	3	1	8 .....	14
Fantini, M. C. A.	4	3	Real .....	377	Fernandes, R. M.	4	1	7 .....	233
Fantini, M. C. A.	5	3	Real .....	633	Fernandes, R. M.	4	1	7 .....	233
Fantini, M. C. A.	5	3	Real .....	622	Ferrara Junior, N. F.	3	3	Real .....	102
Farenzena, L. S.	5	3	Real .....	619	Ferrara Junior, N. F.	3	3	Real .....	99
Faria, G. J. C.	3	1	5 .....	4	Ferrara, M.	5	1	2 .....	461
Faria, G. J. C.	4	2	5 .....	262	Ferraz, A.	3	3	Real .....	146
Faria, G. J. C.	3	3	Real .....	88	Ferraz, A.	5	1	9 .....	467
Faria, G. J. C.	3	3	Real .....	94	Ferraz, A.	5	1	9 .....	467
Faria, N. V. C.	4	2	5 .....	262	Ferraz, A. C.	5	1	Imperial....	459
Faria, N. V. C.	3	3	Real .....	88	Ferraz, A. C.	5	3	Real .....	602
Faria, N. V. C.	3	3	Real .....	94	Ferraz, A. C.	5	3	Real .....	602
Faria, R. M.	5	3	Real .....	615	Ferraz, A. C.	5	3	Real .....	591
Faria, R. M.	5	3	Real .....	616	Ferraz, A. C.	5	3	Real .....	598
Faria, R. M.	5	1	2 .....	462	Ferraz, A. C.	4	3	Real .....	298
Faria, R. M.	5	3	Real .....	618	Ferraz, G. M.	3	3	Real .....	124
Faria, R. M.	4	1	8 .....	249	Ferreira Neto, S. J.	4	3	Real .....	311
Faria, R. M.	4	3	Real .....	394	Ferreira, C. L.	5	3	Real .....	637
Faria, R. M.	3	1	2 .....	30	Ferreira, C. P.	4	3	Real .....	306
Faria, R. M.	4	3	Real .....	393	Ferreira, F. F.	5	3	Real .....	636
Faria, R. M.	5	3	Real .....	615	Ferreira, F. F.	4	3	Real .....	297
Farias Junior, I. F.	3	3	Real .....	213	Ferreira, J. L. S.	3	3	Real .....	219
Farias Junior, I. F.	4	1	Topazio....	256	Ferreira, J. M. C.	3	3	Real .....	186
Farias, G. A.	5	3	Real .....	601	Ferreira, J. M. C.	5	3	Real .....	563
Farias, G. A.	5	2	4 .....	497	Ferreira, L. E. C.	5	3	Real .....	567
Farias, G. A.	4	3	Real .....	391	Ferreira, L. M.	4	3	Real .....	411
Farias, G. A.	5	2	4 .....	498	Ferreira, N. G.	3	3	Real .....	206
Farias, G. A.	5	3	Real .....	599	Ferreira, N. G.	3	3	Real .....	199
Farias, G. A.	4	2	Imperial....	273	Ferreira, S. O.	3	3	Real .....	157
Farias, G. A.	3	3	Real .....	149	Ferreira, S. O.	3	1	Imperial....	21
Farias, P. C. M. A.	5	2	Topazio....	499	Ferreira, S. O.	3	3	Real .....	148
Fattore, M. S. L.	3	3	Real .....	108	Figueiredo Neto, A. M.	3	3	Real .....	173
Favotto, I. R.	4	1	Imperial....	246	Figueiredo Neto, A. M.	3	2	3 .....	57
Fazzio, A.	4	2	Imperial....	274	Figueiredo Neto, A. M.	5	1	3 .....	463
Fazzio, A.	5	2	8 .....	486	Figueiredo Neto, A. M.	3	2	3 .....	56
Fazzio, A.	5	3	Real .....	594	Figueiredo Neto, A. M.	5	1	3 .....	465
Fazzio, A.	5	3	Real .....	604	Figueiredo Neto, A. M.	5	1	3 .....	465
Fazzio, A.	5	3	Real .....	594	Figueiredo, W.	4	3	Real .....	321
Fazzio, A.	5	3	Real .....	607	Figueiredo, W.	4	3	Real .....	311
Fedossov, S.	5	3	Real .....	621	Figueiredo, W.	4	3	Real .....	322
Fedossov, S.	5	3	Real .....	614	Figueiredo, W.	5	3	Real .....	611
Feitosa, C. A. C.	3	3	Real .....	219	Figueiredo, W.	4	3	Real .....	308
Feitosa, C. C. A.	4	1	7 .....	231	Fireman, E. C.	3	3	Real .....	109
Feitosa, C. C. A.	4	1	7 .....	231	Fittipaldi, I. P.	5	1	Safira.....	442
Feitosa, C. C. A.	4	3	Real .....	336	Fittipaldi, I. P.	3	3	Real .....	118

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Pittipaldi, I. P.	5	3	Real .....	548	Freire, R. R.	5	3	Real .....	511
Flemming Neto, J.	4	1	5 .....	227	Freire, S. L. S.	5	3	Real .....	592
Flemming Neto, J.	5	3	Real .....	527	Freire, S. L. S.	4	1	Imperial...	245
Flemming Neto, J.	5	3	Real .....	528	Freire, V. N.	5	3	Real .....	601
Florencio Junior, J.	4	1	Safira.....	229	Freire, V. N.	5	2	4 .....	497
Florencio Junior, J.	3	1	7 .....	11	Freire, V. N.	4	3	Real .....	391
Florencio, O.	3	3	Real .....	122	Freire, V. N.	4	2	Imperial...	273
Florencio, O.	5	3	Real .....	567	Freire, V. N.	5	3	Real .....	599
Florencio, O.	3	3	Real .....	121	Freire, V. N.	3	3	Real .....	161
Flores, M.	3	3	Real .....	82	Freire, V. N.	4	2	Imperial...	273
Foerster, C. E.	4	3	Real .....	360	Freire, V. N.	3	3	Real .....	149
Foglio, M. E.	3	1	6 .....	20	Freitas, D. S.	5	3	Real .....	651
Foglio, M. E.	3	3	Real .....	117	Freitas, J. C. C.	4	2	7 .....	265
Foglio, M. E.	3	3	Real .....	109	Freitas, J. C. C.	5	3	Real .....	559
Fonseca, A. L. A.	4	3	Real .....	389	Freitas, R. S.	5	3	Real .....	592
Fonseca, A. L. A.	4	3	Real .....	387	Frejlich, J.	3	2	8 .....	50
Fonseca, P. T.	4	3	Real .....	347	Frejlich, J.	4	3	Real .....	433
Fonseca, T. L.	4	3	Real .....	337	Frejlich, J.	4	3	Real .....	428
Fontanini, S.	5	1	3 .....	465	Frejlich, J.	5	1	Topazio....	474
Fontanini, S.	5	1	3 .....	465	Freschi, A. A.	4	3	Real .....	428
Fontes, A.	5	2	Rubi.....	480	Freschi, A. A.	5	1	Topazio....	474
Fontes, M. B.	4	3	Real .....	410	Frichembruder, M.	4	3	Real .....	404
Fontes, M. B.	5	3	Real .....	564	Fritzen, C. L.	3	1	4 .....	36
Formigoni, C. E.	4	3	Real .....	289	Fujii, D. H.	5	3	Real .....	618
Formigoni, C. E.	4	2	Rubi.....	261	Furlan, G. F.	4	3	Real .....	295
Formigoni, C. E.	4	3	Real .....	285	Furtado, C. B. S.	4	2	6 .....	268
Fornes, J. A.	3	3	Real .....	174	Furtado, C. B. S.	5	3	Real .....	605
Fornes, J. A.	5	3	Real .....	509	Furtado, M. T.	5	2	Imperial...	492
Fossey, M. A.	5	3	Real .....	509	Furtado, M. T.	4	1	Topazio....	255
Fossey, M. A.	3	3	Real .....	72	Furuzawa, S. K.	4	3	Real .....	288
Fraga, G. L. F.	5	3	Real .....	561	Furuzawa, S. K.	5	1	Rubi.....	437
Fraga, G. L. F.	3	1	7 .....	13	Gaggioli, N. G.	4	3	Real .....	428
Fragnito, H. L.	4	1	Topazio....	257	Gaggioli, N. G.	4	3	Real .....	424
Fragnito, H. L.	5	2	Topazio....	499	Gaggioli, N. G.	4	3	Real .....	433
Fragnito, H. L.	3	2	Topazio....	65	Gaggioli, N. G.	5	1	Topazio....	475
Fragnito, H. L.	3	3	Real .....	221	Gamarra, L. Z.	3	3	Real .....	122
Fraguas, G. B.	4	3	Real .....	347	Gama, S.	5	3	Real .....	553
Fraguas, G. B.	4	3	Real .....	431	Gama, S.	5	3	Real .....	558
Franceschini Filho, D. F.	3	1	4 .....	36	Gama, S.	5	3	Real .....	554
Franceschini Filho, D. F.	3	3	Real .....	199	Gama, S.	5	3	Real .....	556
Franceschini, M. J.	3	3	Real .....	160	Garavelli, S. L.	5	1	9 .....	467
Franco, B. J. O.	4	3	Real .....	341	Garcia, C. G.	5	3	Real .....	571
Franco, R. W. A.	4	3	Real .....	395	Garcia, F.	5	3	Real .....	551
Franco, R. W. A.	4	3	Real .....	357	Garcia, F.	5	3	Real .....	565
Freire Junior, F. L.	3	3	Real .....	202	Garcia, F. C.	5	1	6 .....	450
Freire Junior, F. L.	3	1	4 .....	36	Garcia, F. C.	5	1	6 .....	451
Freire Junior, F. L.	3	3	Real .....	199	Garcia, F. C.	3	2	Topazio....	64
Freire, H. J. P.	3	3	Real .....	70	Garcia, G. A.	3	3	Real .....	216
Freire, I. A.	4	3	Real .....	425	Garcia, G. A.	3	3	Real .....	214
Freire, J. A. K.	5	3	Real .....	601	Garcia, G. A.	5	2	5 .....	482
Freire, P. T. C.	3	3	Real .....	140	Garcia, P. M. P.	4	3	Real .....	433
Freire, P. T. C.	5	1	8 .....	455	Garcia, P. M. P.	5	1	Topazio....	474
Freire, P. T. C.	4	1	2 .....	237	Garcia, V. H.	5	3	Real .....	572
Freire, P. T. C.	4	1	2 .....	238	Geraldo, J. M.	4	3	Real .....	387
Freire, R. R.	4	3	Real .....	400	Ghiner, A.	5	3	Real .....	634
Freire, R. R.	3	3	Real .....	119	Ghiner, A.	5	3	Real .....	650

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Ghiner, A.	4	1	2	239	Grande, P. L.	5	3	Real	640
Ghiner, A.	5	3	Real	647	Grandi, B. C. S.	4	3	Real	311
Ghiner, A.	5	3	Real	578	Grandi, B. C. S.	4	3	Real	322
Ghivelder, L.	3	1	9	34	Grandini, C. R.	3	3	Real	122
Ghivelder, L.	3	1	9	34	Grandini, C. R.	5	3	Real	567
Ghivelder, L.	3	1	9	33	Grandini, C. R.	3	3	Real	121
Ghivelder, L.	4	1	9	252	Grandini, C. R.	5	3	Real	573
Ghivelder, L.	3	3	Real	189	Granja, S. C. G.	5	3	Real	644
Giaccometti, J. A.	5	3	Real	616	Grillo, M. L. N.	4	3	Real	355
Giles, C.	3	2	7	49	Guedes, F. B.	5	3	Real	580
Giles, C.	4	3	Real	348	Guedes, K. J.	5	3	Real	586
Jimenez, A. P. L.	4	3	Real	417	Guerra, A. B.	4	3	Real	290
Giordanengo, B.	4	3	Real	410	Guerra, A. B.	4	3	Real	287
Giordanengo, B.	4	3	Real	413	Guerra, A. B.	4	3	Real	285
Giordanengo, B.	5	3	Real	562	Guerreiro, H. A.	3	3	Real	169
Giotto, M. V.	4	3	Real	397	Guimaraes, A. P.	5	3	Real	576
Gluzman, S.	4	3	Real	310	Guimaraes, A. P.	5	3	Real	550
Gobato, Y. G.	3	3	Real	151	Guimaraes, A. P.	5	3	Real	558
Gobbi, A. L.	4	1	Imperial	245	Guimaraes, A. P.	5	3	Real	555
Gobbi, A. L.	3	3	Real	208	Guimaraes, A. P.	5	3	Real	552
Gobbi, A. L.	5	3	Real	600	Guimaraes, B. G.	3	3	Real	74
Gobbi, A. L.	5	3	Real	596	Guimaraes, F. E. G.	3	3	Real	169
Gobbi, A. O. M.	4	2	6	268	Guimaraes, F. E. G.	3	2	Topazio	63
Gomes Junior, S. R.	4	3	Real	407	Guimaraes, F. E. G.	4	3	Real	384
Gomes Junior, S. R.	4	3	Real	401	Guimaraes, H. X.	5	3	Real	645
Gomes, A. M. S.	5	2	7	485	Guimaraes, P. R. C.	5	3	Real	535
Gomes, A. M. S.	5	2	7	485	Guimaraes, P. S. S.	5	1	Imperial	456
Gomez, S. L.	3	3	Real	123	Guimaraes, P. S. S.	5	1	Imperial	456
Gomide, J. V. B.	5	2	5	482	Guimaraes, P. S. S.	4	3	Real	367
Goncalves Neto, L.	4	3	Real	427	Guimaraes, P. S. S.	4	3	Real	381
Goncalves Neto, L.	5	1	Topazio	475	Gupta, H. M.	5	3	Real	603
Goncalves, L. C. D.	4	3	Real	388	Gusev, G.	4	3	Real	362
Goncalves, M. A. M. S.	3	1	Rubi	1	Gusev, G.	4	3	Real	362
Goncalves, N.	3	3	Real	88	Gusev, G.	4	3	Real	382
Goncalves, N.	3	3	Real	94	Gusev, G.	4	1	Imperial	248
Goncalves, W. M.	3	3	Real	96	Haar, E. T.	3	1	Imperial	23
Goncalves, W. M.	3	3	Real	98	Haar, E. T.	4	3	Real	337
Goncalves, W. M.	3	3	Real	108	Habesch, R.	5	3	Real	524
Goncalves, W. M.	5	3	Real	536	Haetinger, C. M.	3	3	Real	189
Gonzales, R. R. R.	4	3	Real	365	Hallouche, B.	5	1	7	445
Gonzalez, J. A.	3	3	Real	99	Hanamoto, L. K.	5	3	Real	582
Gonzalez, J. A.	3	3	Real	103	Hasenack, C. M.	5	3	Real	630
Gonzalez, J. A.	3	3	Real	100	Hasenack, C. M.	5	3	Real	637
Gonzalez, J. P. D.	5	1	6	450	Hasenack, C. M.	5	3	Real	635
Gonzalez, J. P. D.	4	3	Real	395	Hayashida, R.	3	3	Real	161
Gonzalez, J. P. D.	4	3	Real	357	Hayashida, R.	4	3	Real	349
Gonzalez, J. P. D.	4	3	Real	397	Hayashida, R.	4	3	Real	345
Gonzalez, J. P. D.	5	3	Real	580	Hayashi, M. A.	3	3	Real	167
Gorenstein, A.	5	3	Real	636	Henriques, E. F.	3	3	Real	172
Gorenstein, A.	5	3	Real	622	Henriques, V. B.	3	3	Real	172
Gorenstein, A.	5	3	Real	635	Henriques, V. B.	4	3	Real	401
Gouveia, M. E.	3	3	Real	116	Henriques, V. B.	4	3	Real	313
Gouveia, M. E.	3	3	Real	115	Henriques, V. B.	5	3	Real	502
Graeff, C. F. O.	4	2	4	277	Hernandes, A. C.	4	1	2	237
Graeff, C. F. O.	3	1	Imperial	24	Hernandes, A. C.	3	3	Real	88
Grande, P. L.	4	2	5	262	Hernandes, A. C.	4	1	6	241

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Hernandes, A. C.	5	3	Real .....	585	Kellermann, G.	4	3	Real .....	349
Hernandes, A. C.	5	3	Real .....	588	Keller, W. A.	4	3	Real .....	341
Hernandes, A. C.	4	1	6 .....	243	Keller, W. A.	4	3	Real .....	339
Hernandes, A. C.	3	2	Topazio....	63	Kinouchi Filho, O.	5	3	Real .....	514
Hernandes, A. C.	4	1	2 .....	239	Kitano, C.	5	2	Topazio....	500
Hernandes, A. C.	4	1	6 .....	242	Kitano, C.	3	3	Real .....	222
Hernandes, A. C.	5	3	Real .....	587	Klautau, A. B.	4	3	Real .....	333
Hernandes, A. C.	4	3	Real .....	433	Kleiman, G. G.	5	3	Real .....	626
Hernandes, A. C.	5	3	Real .....	578	Kleiman, G. G.	3	3	Real .....	198
Hernandes, A. C.	3	3	Real .....	126	Kleiman, G. G.	5	1	4 .....	470
Hernandes, C. S.	3	3	Real .....	135	Kleiman, G. G.	3	3	Real .....	191
Hickmann, J. S.	3	3	Real .....	90	Knobel, M.	4	3	Real .....	331
Hidalgo, A. A.	3	3	Real .....	170	Knobel, M.	4	3	Real .....	329
Hinrichs, R.	4	1	2 .....	239	Knobel, M.	5	1	7 .....	446
Hogert, E.	4	3	Real .....	433	Knobel, M.	4	3	Real .....	335
Hohenfeld, D. P.	4	3	Real .....	360	Knobel, M.	4	3	Real .....	332
Hohenfeld, D. P.	4	3	Real .....	358	Knobel, M.	5	1	7 .....	446
Horowitz, F.	5	3	Real .....	631	Koiller, B.	5	1	Imperial...	459
Hoyos, F. J.	5	3	Real .....	553	Koning, M.	5	3	Real .....	575
Hubler, R.	4	3	Real .....	290	Krause, J. C.	5	3	Real .....	571
Hubler, R.	4	3	Real .....	287	Krause, J. C.	5	3	Real .....	559
Hubler, R.	4	3	Real .....	285	Krebs, P. R.	5	3	Real .....	516
Hubler, R.	3	1	4 .....	35	Kugel, G.	3	3	Real .....	138
Huruta, R. R.	5	2	Rubi.....	480	Kugel, G.	3	3	Real .....	138
Iikawa, F.	4	1	Imperial...	245	Kuva, S. M.	5	3	Real .....	514
Iikawa, F.	3	3	Real .....	165	Lacerda, A. H.	5	3	Real .....	562
Iikawa, F.	3	3	Real .....	164	Lacerda, A. H.	3	2	Safra.....	47
Imaizumi, M.	5	3	Real .....	573	Lacerda, A. H.	5	3	Real .....	551
Imaizumi, M.	5	3	Real .....	576	Lacerda, M. M.	3	1	4 .....	36
Izzo, D.	4	2	8 .....	275	Lacerda, M. M.	3	3	Real .....	199
Jagosich, F. H.	3	3	Real .....	220	Lacerda, R. G.	3	3	Real .....	155
Janotti, A.	5	3	Real .....	598	Laks, B.	5	3	Real .....	573
Japiassu, G. M.	3	1	7 .....	10	Laks, B.	5	3	Real .....	576
Japiassu, G. M.	3	3	Real .....	116	Landers, R.	5	3	Real .....	626
Japiassu, G. M.	3	3	Real .....	111	Landers, R.	3	3	Real .....	198
Jardim, R. F.	5	3	Real .....	585	Landers, R.	5	1	4 .....	470
Jardim, R. F.	3	3	Real .....	121	Lara, M. C. F. L.	3	1	3 .....	28
Jardim, R. F.	4	3	Real .....	415	Lara, M. C. F. L.	5	3	Real .....	608
Jardim, R. F.	4	1	9 .....	253	Latge, A. B.	4	3	Real .....	379
Jardim, R. F.	4	3	Real .....	414	Latge, A. B.	4	1	Imperial...	247
Jardim, R. F.	4	3	Real .....	414	Latge, A. B.	4	3	Real .....	385
Jardim, R. F.	4	3	Real .....	412	Laureto, E.	3	3	Real .....	144
Jardim, R. F.	4	3	Real .....	413	Laureto, E.	4	3	Real .....	374
Javier, L. A. T.	3	3	Real .....	129	Leal, C. E. S.	5	1	5 .....	438
Jesus, E. F. O.	3	3	Real .....	81	Leal, J. C. F.	4	1	6 .....	244
Jesus, V. L. B.	5	3	Real .....	552	Leao, S. A.	3	2	Imperial...	55
Joras, F. S.	3	3	Real .....	91	Legoas, S. B.	5	3	Real .....	568
Joras, F. S.	3	1	5 .....	6	Leitao, U. A.	5	2	3 .....	494
Jorge, M. P. P. M.	3	3	Real .....	222	Leitao, U. A.	3	1	3 .....	25
Juliao, J. F.	5	3	Real .....	624	Leitao, U. A.	5	2	7 .....	484
Kagesawa, S. T. S.	4	3	Real .....	392	Leite, J. R.	4	3	Real .....	363
Kakuno, E. M.	4	3	Real .....	330	Leite, J. R.	4	3	Real .....	370
Kakuno, E. M.	4	3	Real .....	334	Leite, J. R.	3	3	Real .....	158
Kalinowski, H. J.	5	2	Topazio....	501	Leite, J. R.	4	3	Real .....	388
Kanashiro, L. S.	3	3	Real .....	130	Leite, J. R.	3	3	Real .....	162
Kellermann, G.	4	3	Real .....	348	Leite, J. R.	5	1	Imperial...	458

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Leite, J. R.	4	3	Real .....	381	Lima, J. F.	3	1	8 .....	16
Leite, J. R.	4	3	Real .....	376	Lima, K. A.	5	3	Real .....	562
Leite, J. R.	4	3	Real .....	376	Lima, K. A.	3	2	Safira.....	47
Leite, J. R.	4	3	Real .....	375	Lima, L. C. S.	5	3	Real .....	536
Leite, J. R.	5	1	Imperial....	456	Lima, L. C. S.	4	2	7 .....	265
Leite, J. R.	4	3	Real .....	378	Lima, M. A. P.	3	1	5 .....	5
Leite, J. R.	4	3	Real .....	369	Lima, M. A. P.	3	1	5 .....	5
Leite, J. R.	4	3	Real .....	368	Lima, M. C. A.	4	2	Imperial....	273
Leite, J. R.	5	3	Real .....	596	Lima, M. C. A.	3	3	Real .....	149
Leite, J. R. R.	3	1	Topazio....	39	Lima, N. A.	3	1	7 .....	13
Leite, N. F.	3	3	Real .....	203	Lima, N. F.	5	3	Real .....	504
Leite, N. F.	3	3	Real .....	206	Lima, O. F.	3	2	9 .....	60
Leite, N. F.	3	3	Real .....	205	Lima, O. F.	4	1	9 .....	251
Leite, N. F.	3	3	Real .....	199	Lima, O. F.	3	3	Real .....	186
Leite, V. B. P.	3	1	Rubi.....	1	Lima, O. F.	3	3	Real .....	189
Lemaire, T. J.	5	3	Real .....	589	Lima, W. L. C.	3	1	7 .....	10
Lemaire, T. J.	5	3	Real .....	547	Lima, W. M.	5	3	Real .....	570
Lemaire, T. J.	4	3	Real .....	429	Linhares, M. P.	3	3	Real .....	71
Lemaire, T. J.	4	3	Real .....	422	Linhares, M. P.	4	3	Real .....	284
Leme, D. G.	4	3	Real .....	434	Linhares, M. P.	4	3	Real .....	283
Leon, J. A. V.	3	1	8 .....	16	Lino, A. T.	4	3	Real .....	369
Lepienski, C. M.	5	3	Real .....	618	Lino, A. T.	4	3	Real .....	368
Lepienski, C. M.	3	3	Real .....	198	Lisboa Filho, P. N.	3	3	Real .....	182
Lepienski, C. M.	4	3	Real .....	351	Lopes, F. J. P.	3	3	Real .....	83
Lepienski, C. M.	3	3	Real .....	196	Lopez, J. V.	3	3	Real .....	156
Levine, A.	4	3	Real .....	376	Lopez, J. V.	3	3	Real .....	155
Levin, Y.	4	3	Real .....	399	Lorenzini, F.	4	3	Real .....	290
Levin, Y.	5	2	2 .....	495	Lorenzini, F.	4	3	Real .....	287
Levin, Y.	4	3	Real .....	404	Lorenzini, F.	4	3	Real .....	285
Libardi, H.	3	3	Real .....	217	Lorenzo Filho, O. D.	4	1	5 .....	226
Libardi, H.	5	3	Real .....	625	Lorenzo Filho, O. D.	5	3	Real .....	526
Libero, V. L.	3	2	Safira.....	48	Lourenco, A.	5	3	Real .....	622
Libero, V. L.	3	1	7 .....	13	Lourenco, A.	5	3	Real .....	635
Libero, V. L.	5	3	Real .....	539	Lourenco, C. S.	5	3	Real .....	567
Libero, V. L.	5	3	Real .....	569	Louro, S. R. W.	4	1	Rubi.....	223
Lima Junior, M. M.	5	3	Real .....	604	Louro, S. R. W.	3	3	Real .....	71
Lima, A. F.	5	3	Real .....	647	Louro, S. R. W.	5	3	Real .....	508
Lima, A. P.	3	3	Real .....	158	Lucca, R. A. S.	4	2	Rubi.....	258
Lima, A. P.	4	3	Real .....	381	Lucena, L. S.	4	3	Real .....	407
Lima, A. P.	4	3	Real .....	378	Lucena, L. S.	4	3	Real .....	401
Lima, A. R.	5	3	Real .....	536	Lucena, L. S.	4	2	8 .....	275
Lima, A. V.	4	3	Real .....	309	Lucena, L. S.	4	3	Real .....	403
Lima, C. J.	4	3	Real .....	293	Luna, H. M. R.	3	3	Real .....	88
Lima, C. J.	4	3	Real .....	291	Luna, H. M. R.	3	3	Real .....	94
Lima, C. J.	4	3	Real .....	292	Luz, E. M. S.	4	3	Real .....	402
Lima, C. R. A.	4	3	Real .....	430	Lyra, M. L.	4	3	Real .....	309
Lima, J. C.	3	1	Imperial....	22	Lyra, M. L.	4	3	Real .....	323
Lima, J. C.	3	3	Real .....	166	Lyra, M. L.	5	3	Real .....	546
Lima, J. C.	5	3	Real .....	635	Macedo, L. G. M.	3	1	3 .....	26
Lima, J. F.	3	3	Real .....	125	Macedo, M. A.	5	3	Real .....	626
Lima, J. F.	3	3	Real .....	131	Macedo, Z. S.	3	1	8 .....	16
Lima, J. F.	3	3	Real .....	131	Machado, A. B.	5	3	Real .....	533
Lima, J. F.	3	1	8 .....	15	Machado, A. B.	5	3	Real .....	533
Lima, J. F.	3	3	Real .....	133	Machado, A. J. S.	5	1	9 .....	468
Lima, J. F.	3	3	Real .....	128	Machado, A. J. S.	4	3	Real .....	418
Lima, J. F.	3	3	Real .....	134	Machado, A. J. S.	3	1	9 .....	32

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Machado, A. M.	5	3	Real .....	590	Marega Junior, E.	4	3	Real .....	373
Machado, A. M.	3	3	Real .....	165	Marega Junior, E.	3	3	Real .....	160
Machado, A. M.	3	3	Real .....	164	Marega Junior, E.	4	3	Real .....	382
Machado, A. M.	3	3	Real .....	163	Marega Junior, E.	3	2	Imperial....	55
Machado, A. M.	3	3	Real .....	208	Marega Junior, E.	4	3	Real .....	386
Machado, A. M.	5	3	Real .....	600	Marega, J. A. M. M.	3	3	Real .....	79
Machado, F. L. A.	4	1	9 .....	252	Mariz, A. M.	4	3	Real .....	377
Machado, F. L. A.	5	1	7 .....	445	Marletta, A.	4	3	Real .....	366
Machado, P. C. M.	4	3	Real .....	366	Marmolejo, E. M.	5	1	6 .....	451
Machado, P. C. M.	4	3	Real .....	364	Marotti, R. E.	4	3	Real .....	389
Machado, R. G.	3	3	Real .....	161	Martin, A. A.	4	3	Real .....	410
Machado, R. G.	4	3	Real .....	349	Martin, A. A.	5	3	Real .....	563
Machado, R. G.	4	3	Real .....	345	Martinez, L. E. B.	5	3	Real .....	508
Machado, W. V.	5	3	Real .....	606	Martinez, L. E. B.	5	3	Real .....	505
Machovets, D.	4	1	9 .....	251	Martini, S.	4	3	Real .....	363
Maciel, G. S.	5	1	6 .....	453	Martini, S.	4	3	Real .....	370
Maciel, G. S.	5	1	6 .....	453	Martins Filho, J. F.	3	3	Real .....	218
Magalhaes, A. C. N.	3	3	Real .....	101	Martins Filho, J. F.	4	1	Topazio....	255
Magalhaes, D. V.	3	3	Real .....	141	Martins, C. S.	5	1	7 .....	444
Magalhaes, M.	3	2	3 .....	56	Martins, J. S. S.	5	3	Real .....	518
Maghelly, C. C.	5	3	Real .....	508	Martins, L. F. O.	5	3	Real .....	630
Maghelly, C. C.	5	3	Real .....	510	Martins, L. F. O.	5	3	Real .....	635
Maialle, M. Z.	3	3	Real .....	151	Martins, M. L.	5	2	Rubi.....	479
Maialle, M. Z.	4	1	Imperial....	248	Martins, M. L.	5	3	Real .....	547
Maialle, M. Z.	4	3	Real .....	385	Martins, M. L.	5	3	Real .....	534
Maki, J. N.	3	2	3 .....	57	Martins, M. L.	5	3	Real .....	511
Makler, S. S.	3	3	Real .....	151	Martins, O. L. B.	4	3	Real .....	430
Makler, S. S.	4	3	Real .....	367	Martins, R. B.	4	3	Real .....	328
Maldonado, E. P.	4	1	Topazio....	256	Martins, R. B.	3	3	Real .....	155
Maldonado, E. P.	3	3	Real .....	209	Martins, R. B.	5	1	4 .....	473
Maldonado, E. P.	3	3	Real .....	139	Martins, R. B.	3	3	Real .....	167
Mammana, A. P.	3	3	Real .....	171	Martins, R. B.	5	3	Real .....	590
Mammana, A. P.	3	3	Real .....	172	Martins, R. B.	3	3	Real .....	208
Mammana, V. P.	3	3	Real .....	206	Martins, R. B.	5	3	Real .....	600
Maneiro, A. M.	4	3	Real .....	300	Masili, M.	5	1	5 .....	438
Manganote, E. J. T.	5	2	Imperial....	492	Massalami, M. E.	4	1	9 .....	252
Manganote, E. J. T.	4	1	Topazio....	255	Matias, J. G. N.	5	3	Real .....	624
Manguiera, A. G. S.	3	3	Real .....	131	Matinaga, F. M.	4	1	Imperial....	245
Manoel, E. R.	5	3	Real .....	585	Matinaga, F. M.	4	3	Real .....	380
Mansanares, A. M.	3	3	Real .....	155	Matos, M. O. M.	5	3	Real .....	597
Mansanares, A. M.	3	3	Real .....	81	Matos, M. O. M.	5	3	Real .....	647
Mansanares, A. M.	3	3	Real .....	154	Matsuda, K.	5	1	Topazio....	476
Mansanares, A. M.	3	3	Real .....	205	Matsuoka, M.	3	3	Real .....	126
Mansanares, A. M.	3	1	3 .....	27	Matsuoka, M.	5	3	Real .....	638
Mansanares, A. M.	3	3	Real .....	68	Matsuoka, M.	5	3	Real .....	639
Manzoli, J. E.	4	3	Real .....	371	Matsuoka, M.	3	3	Real .....	122
Manzoli, J. E.	4	3	Real .....	361	Matsuoka, M.	3	3	Real .....	124
Maraes, L. B. O. A.	4	3	Real .....	364	Mattos, C. R.	5	3	Real .....	516
Maraes, L. B. O. A.	5	3	Real .....	588	Mattoso, L. H. C.	5	1	2 .....	462
Marcassa, L. G.	3	2	5 .....	46	Mattoso, L. H. C.	5	3	Real .....	618
Marcassa, L. G.	4	1	5 .....	227	Mattoso, L. H. C.	3	3	Real .....	180
Marcassa, L. G.	5	3	Real .....	528	Mattoso, L. H. C.	3	3	Real .....	181
Marcassa, L. G.	5	3	Real .....	526	Mattoso, L. H. C.	3	1	2 .....	29
Marega Junior, E.	3	3	Real .....	143	Mattoso, L. H. C.	4	3	Real .....	393
Marega Junior, E.	4	3	Real .....	372	Matuo, C. Y.	5	1	3 .....	463
Marega Junior, E.	4	3	Real .....	373	Mazzali, C.	4	1	Topazio....	257

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Mazzali, C.	5	2	Topazio....	499	Messias, F. R.	3	3	Real .....	152
Mazzali, C.	3	2	Topazio....	65	Messias, L. G. O.	4	3	Real .....	386
Mazzocchi, V. L.	5	3	Real .....	589	Mestnik Filho, J.	3	3	Real .....	127
Mazzoni, M. S. C.	5	3	Real .....	529	Mestnik Filho, J.	5	3	Real .....	565
Medeiros Neto, J. A.	5	1	6 .....	452	Mestnik Filho, J.	5	3	Real .....	552
Medeiros Neto, J. A.	3	2	6 .....	53	Mestnik Filho, J.	5	3	Real .....	560
Medeiros Neto, J. A.	5	1	6 .....	451	Meucci, R. D.	3	3	Real .....	198
Medeiros, D.	5	3	Real .....	546	Meucci, R. D.	4	3	Real .....	351
Medeiros, R.	4	3	Real .....	299	Milman, F. S.	4	3	Real .....	321
Medeiros, S. N.	4	1	9 .....	252	Milori, D. M. B. P.	4	2	Topazio....	280
Melgarejo, A.	4	3	Real .....	405	Milori, D. M. B. P.	5	3	Real .....	529
Mello, B. A.	3	3	Real .....	103	Milori, D. M. B. P.	4	1	5 .....	227
Mello, B. A.	3	3	Real .....	112	Milori, D. M. B. P.	5	3	Real .....	528
Mello, N. C.	4	3	Real .....	395	Miola, E. J.	5	3	Real .....	638
Mello, N. C.	5	3	Real .....	580	Miotto, R.	4	3	Real .....	298
Mello, V. D.	4	3	Real .....	327	Miranda, J. R. A.	4	3	Real .....	281
Melo, A. P.	3	3	Real .....	128	Miranda, L. C. B.	5	3	Real .....	511
Melo, C. A. S.	4	3	Real .....	406	Miranda, M. G. M.	4	3	Real .....	327
Melo, C. A. S.	3	3	Real .....	214	Miranda, M. G. M.	5	3	Real .....	641
Melo, F. E. A.	5	1	8 .....	455	Miranda, M. G. M.	4	3	Real .....	329
Melo, F. E. A.	4	1	2 .....	237	Miranda, M. G. M.	5	1	7 .....	445
Melo, F. E. A.	4	1	2 .....	240	Miranda, P. E. V.	5	1	7 .....	447
Melo, F. E. A.	4	1	2 .....	238	Miranda, P. E. V.	5	3	Real .....	643
Melo, F. E. A.	3	2	8 .....	51	Miranda, R. M. N.	3	2	4 .....	62
Melo, M. A. C.	4	3	Real .....	417	Mirsch, T.	3	1	4 .....	35
Melo, M. A. C.	5	3	Real .....	562	Miskys, C. R.	3	3	Real .....	164
Melo, P. L.	4	3	Real .....	293	Miskys, C. R.	3	3	Real .....	163
Melo, S. M. L.	4	1	5 .....	225	Misoguti, L.	3	3	Real .....	139
Melo, W. S.	3	3	Real .....	91	Misoguti, L.	3	3	Real .....	141
Melo, W. S.	4	2	5 .....	263	Misoguti, L.	5	3	Real .....	588
Melo, W. S.	4	2	5 .....	263	Miwa, R. H.	5	3	Real .....	602
Mendes Filho, J.	5	1	8 .....	455	Miwa, R. H.	5	3	Real .....	602
Mendes Filho, J.	3	3	Real .....	171	Mocellin, A.	3	3	Real .....	193
Mendes Filho, J.	4	1	2 .....	237	Mocellin, A.	3	3	Real .....	195
Mendes Filho, J.	4	1	2 .....	240	Mocellin, A.	3	3	Real .....	182
Mendes Filho, J.	4	1	2 .....	238	Mohallem, J. R.	4	3	Real .....	296
Mendes Filho, J.	3	2	8 .....	51	Mohallem, J. R.	5	1	5 .....	439
Mendes, K. C.	5	1	7 .....	445	Mohallem, N. D. S.	4	3	Real .....	339
Mendes, L. G.	4	3	Real .....	357	Mokross, B. J.	5	3	Real .....	601
Mendes, L. G.	4	3	Real .....	356	Mombach, J. C. M.	4	1	Rubi.....	223
Mendonca, C. A. C.	3	3	Real .....	144	Mondragon, J. C. T.	4	3	Real .....	410
Mendonca, C. A. C.	5	1	4 .....	473	Monken, C. H.	5	3	Real .....	651
Mendonca, C. A. C.	3	1	Imperial....	21	Monte, A. F. G.	3	3	Real .....	166
Mendonca, C. A. C.	3	3	Real .....	192	Monteiro, E. C.	4	3	Real .....	283
Mendonca, C. R.	5	3	Real .....	653	Monteiro, E. C.	4	3	Real .....	282
Mendonca, J. R. G.	3	3	Real .....	97	Monteiro, E. C.	4	3	Real .....	282
Mendonca, M.	4	3	Real .....	426	Montenegro, E. C.	3	3	Real .....	91
Meneses, E. A.	3	3	Real .....	144	Montenegro, E. C.	3	1	5 .....	6
Meneses, E. A.	4	3	Real .....	368	Montenegro, E. C.	4	2	5 .....	263
Meneses, E. A.	3	3	Real .....	142	Montenegro, E. C.	4	2	5 .....	263
Meneses, E. A.	4	3	Real .....	371	Montenegro, F. C.	5	2	7 .....	483
Menezes, L. S.	5	1	6 .....	453	Montenegro, F. C.	5	3	Real .....	562
Menezes, M. A. F.	4	3	Real .....	400	Montenegro, F. C.	5	3	Real .....	563
Menezes, M. A. F.	5	3	Real .....	520	Montenegro, F. C.	3	2	Safira.....	47
Merchancano, S. T. P.	4	3	Real .....	364	Monzani, A. L.	3	3	Real .....	93
Mergulhao Junior, C.	4	3	Real .....	320	Moraes, F. J. S.	4	2	6 .....	268

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Moraes, F. J. S.	3	1	6	18	Mosca Junior, D. H.	4	3	Real	334
Moraes, F. J. S.	5	3	Real	605	Mossberg, T. W.	4	2	Topazio	
Moraes, I. J.	3	3	Real	123	Mota, F. B.	5	3	Real	604
Moraes, I. J.	5	3	Real	582	Mota, R.	5	3	Real	594
Moraes, J. C. S.	3	3	Real	215	Mota, R. P.	3	2	2	59
Moraes, J. C. S.	3	3	Real	89	Mota, R. P.	4	3	Real	281
Moraes, J. C. S.	3	3	Real	220	Mota, R. P.	5	3	Real	636
Moraes, J. C. S.	3	3	Real	94	Mota, R. P.	4	3	Real	392
Moraes, J. N. B.	5	3	Real	611	Mota, R. P.	4	3	Real	396
Moraes, M. A. A.	3	3	Real	90	Mota, R. P.	4	3	Real	396
Moraes, M. A. B.	5	3	Real	633	Mota, R. P.	4	3	Real	393
Moraes, M. A. B.	5	3	Real	632	Motta, E. F.	5	3	Real	578
Moraes, M. A. B.	5	3	Real	626	Moukarzel, C. F.	4	3	Real	317
Moraes, M. B.	5	3	Real	619	Moukarzel, C. F.	5	3	Real	542
Morais, A. V.	3	1	3	25	Moura, C. S.	5	3	Real	553
Morais, P. C.	5	3	Real	610	Mucciolo, E. R.	3	2	Imperial	54
Morais, P. C.	4	1	8	250	Munin, E.	3	3	Real	215
Morais, P. C.	3	1	3	26	Muniz, R. B.	4	3	Real	333
Morais, P. C.	5	3	Real	609	Muniz, R. B.	4	2	7	265
Morais, P. C.	3	2	3	56	Muniz, S. R.	3	2	5	46
Morais, P. C.	5	3	Real	613	Muniz, S. R.	4	2	Topazio	280
Morais, P. C.	3	1	3	26	Muniz, S. R.	5	3	Real	528
Morais, P. C.	3	1	3	28	Munoz, W. M. O.	5	3	Real	591
Morais, P. C.	5	3	Real	608	Munte, C.	3	3	Real	68
Morais, P. C.	3	1	3	27	Muramatsu, M.	4	3	Real	427
Morais, P. C.	5	3	Real	609	Muramatsu, M.	5	1	Topazio	476
Morais, P. C.	5	3	Real	608	Muramatsu, M.	4	3	Real	423
Morais, P. C.	5	3	Real	606	Muramatsu, M.	5	3	Real	631
Morais, P. C.	5	3	Real	592	Nader, G.	3	3	Real	211
Morato, S. P.	3	3	Real	209	Nader, G.	3	3	Real	218
Morato, S. P.	3	3	Real	139	Nagashima, H. N.	5	3	Real	615
Morato, S. P.	3	3	Real	217	Napolitano, R. J.	3	2	5	46
Morato, S. P.	4	1	6	241	Narvaez, G. A.	4	3	Real	390
Morato, S. P.	3	3	Real	120	Narvaez, G. A.	4	3	Real	384
Morato, S. P.	3	3	Real	131	Nascente, P. A. P.	5	1	4	470
Moreira, A. A.	4	3	Real	403	Nascente, P. A. P.	3	1	8	17
Moreira, A. G.	4	3	Real	315	Nascimento, A. C. A.	3	3	Real	175
Moreira, E. C.	4	3	Real	360	Nascimento, G. C.	4	3	Real	394
Moreira, J. G. M. A.	5	3	Real	538	Nascimento, O. R.	3	1	2	30
Moreira, J. G. M. A.	5	3	Real	534	Nascimento, O. R.	3	3	Real	85
Moreira, R. L.	5	1	8	454	Nascimento, V. B.	3	3	Real	191
Moreira, R. L.	4	1	6	242	Natalense, A. P. P.	3	1	5	5
Moreira, S. G. C.	5	1	8	448	Navarro, M. S.	3	1	8	15
Moreira, S. G. C.	4	1	2	238	Nazareno, H. N.	3	3	Real	100
Moreira, S. G. C.	3	1	3	25	Nazareno, H. N.	3	3	Real	149
Morelhaio, S. L.	4	1	6	244	Negreira, C.	3	3	Real	137
Morelhaio, S. L.	4	2	3	266	Negreira, C.	3	3	Real	135
Morelhaio, S. L.	3	3	Real	167	Negreira, C.	5	3	Real	632
Moreno, A. J. D.	3	2	8	51	Neirotti, J. P.	3	3	Real	111
Morgoon, V. N.	4	3	Real	414	Neirotti, J. P.	4	1	Safira	229
Morgoon, V. N.	4	3	Real	414	Neri, J. W.	3	2	5	45
Mors, P. M.	5	3	Real	640	Nery, S. M. D.	3	2	2	59
Mors, P. M.	5	3	Real	572	Neves, A. C. D.	3	3	Real	67
Mosca Junior, D. H.	4	2	4	278	Neves, B. R. A.	3	3	Real	148
Mosca Junior, D. H.	4	3	Real	330	Neves, B. R. A.	3	3	Real	147
Mosca Junior, D. H.	5	3	Real	625	Neves, B. R. A.	4	2	Imperial	274

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Neves, J. N.	5	3	Real .....	510	Oliveira, F. A.	3	3	Real .....	99
Neves, M. A.	4	1	9 .....	252	Oliveira, F. A.	3	1	Safira.....	7
Neves, U. P. C.	5	2	2 .....	495	Oliveira, F. A.	3	3	Real .....	173
Neves, U. P. C.	4	3	Real .....	408	Oliveira, F. A.	3	1	Safira.....	8
Nobre, E. F.	5	2	4 .....	497	Oliveira, I. S.	4	1	3 .....	235
Nobre, F. D.	5	1	Safira.....	443	Oliveira, I. S.	5	3	Real .....	558
Nobre, F. D.	5	3	Real .....	537	Oliveira, I. S.	5	3	Real .....	555
Nogueira Junior, E.	5	3	Real .....	537	Oliveira, I. S.	5	3	Real .....	552
Nogueira, R. N.	3	3	Real .....	129	Oliveira, J. B. B.	3	3	Real .....	144
Nordi, C. S. D.	3	3	Real .....	85	Oliveira, J. B. B.	4	3	Real .....	368
Notari, A. C.	3	2	Imperial...	55	Oliveira, J. B. B.	3	3	Real .....	142
Novak, M. A.	5	2	7 .....	485	Oliveira, J. B. B.	4	3	Real .....	371
Novak, M. A.	5	2	7 .....	485	Oliveira, J. C. P.	3	2	3 .....	57
Nubile, P.	3	3	Real .....	158	Oliveira, J. E. B.	5	2	Topazio....	500
Nunes, F. D.	3	3	Real .....	139	Oliveira, J. E. B.	3	3	Real .....	222
Nunes, F. D.	3	3	Real .....	141	Oliveira, J. R. R.	3	3	Real .....	107
Nunes, F. D.	5	3	Real .....	588	Oliveira, J. R. R.	5	3	Real .....	646
Nunes, F. D.	3	2	Topazio....	63	Oliveira, J. R. R.	5	3	Real .....	651
Nunes, F. D.	5	3	Real .....	527	Oliveira, L. C.	5	3	Real .....	652
Nunes, F. D.	3	3	Real .....	214	Oliveira, L. M.	3	3	Real .....	70
Nunez, I.	5	3	Real .....	632	Oliveira, L. M. R.	3	1	9 .....	33
Nussenzveig, P. A.	4	1	5 .....	227	Oliveira, L. M. R.	4	1	9 .....	252
Nussenzveig, P. A.	3	2	5 .....	46	Oliveira, L. N.	3	3	Real .....	113
Nussenzveig, P. A.	3	1	Topazio....	41	Oliveira, L. N.	3	1	7 .....	10
Ochi, C. L. C.	3	3	Real .....	114	Oliveira, L. N.	5	1	6 .....	450
Odo, G. Y.	3	3	Real .....	198	Oliveira, L. N.	4	3	Real .....	395
Odo, G. Y.	4	3	Real .....	351	Oliveira, L. N.	5	3	Real .....	539
Oiwa, N. N.	3	3	Real .....	102	Oliveira, L. N.	5	2	6 .....	489
Oiwa, N. N.	3	3	Real .....	99	Oliveira, L. N.	4	3	Real .....	361
Oliveira Junior, N. F.	4	3	Real .....	388	Oliveira, M. A. S.	5	1	8 .....	454
Oliveira Junior, N. F.	3	1	Imperial...	23	Oliveira, M. B.	5	3	Real .....	505
Oliveira Junior, N. F.	4	3	Real .....	328	Oliveira, M. J.	4	3	Real .....	323
Oliveira Junior, N. F.	4	3	Real .....	337	Oliveira, M. J.	5	1	5 .....	439
Oliveira Junior, O. N.	5	1	2 .....	462	Oliveira, M. J.	3	3	Real .....	111
Oliveira Junior, O. N.	3	3	Real .....	180	Oliveira, M. J.	4	3	Real .....	314
Oliveira Junior, O. N.	3	3	Real .....	176	Oliveira, M. J.	3	3	Real .....	97
Oliveira Junior, O. N.	3	3	Real .....	84	Oliveira, M. J.	4	1	Safira.....	229
Oliveira Junior, O. N.	3	3	Real .....	181	Oliveira, M. J.	5	3	Real .....	535
Oliveira Junior, Z. T.	3	3	Real .....	105	Oliveira, N. A.	3	3	Real .....	114
Oliveira, A. C.	3	3	Real .....	93	Oliveira, N. A.	3	3	Real .....	117
Oliveira, A. C.	3	3	Real .....	183	Oliveira, N. A.	3	3	Real .....	113
Oliveira, A. C.	3	3	Real .....	156	Oliveira, N. A.	3	1	7 .....	12
Oliveira, A. C. N.	4	3	Real .....	389	Oliveira, N. A.	3	1	7 .....	10
Oliveira, A. C. N.	4	3	Real .....	387	Oliveira, N. A.	3	3	Real .....	116
Oliveira, A. L.	3	2	2 .....	58	Oliveira, P. M. C.	4	1	Safira.....	228
Oliveira, A. L.	3	3	Real .....	117	Oliveira, P. M. C.	5	3	Real .....	518
Oliveira, A. L.	3	3	Real .....	113	Oliveira, P. M. C.	4	3	Real .....	377
Oliveira, A. L.	5	3	Real .....	617	Oliveira, P. M. C.	5	3	Real .....	536
Oliveira, A. L.	4	3	Real .....	397	Oliveira, R. L.	4	3	Real .....	431
Oliveira, A. L.	5	3	Real .....	526	Oliveira, R. S.	3	2	6 .....	52
Oliveira, C. E. M.	3	3	Real .....	164	Oliveira, S. C.	4	3	Real .....	290
Oliveira, C. E. M.	3	3	Real .....	160	Oliveira, S. L.	3	2	6 .....	52
Oliveira, C. E. M.	3	3	Real .....	163	Oliveira, S. M. M.	5	3	Real .....	518
Oliveira, D. R. C.	4	3	Real .....	369	Oliveira, S. M. M.	5	3	Real .....	519
Oliveira, E. A.	5	2	3 .....	493	Oliveira, W. C.	3	1	7 .....	10
Oliveira, E. N.	4	3	Real .....	358	Oliveros, M. C.	4	3	Real .....	329

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Olivieri, J. R.	5	3	Real .....	510	Parente, C. B. R.	4	3	Real .....	332
Omena, H. A.	3	3	Real .....	161	Pasa, A. A.	5	3	Real .....	630
Omena, H. A.	4	3	Real .....	349	Pasa, A. A.	5	3	Real .....	635
Omena, H. A.	4	3	Real .....	345	Pascoal, H. B.	4	3	Real .....	353
Onmori, R. K.	4	3	Real .....	393	Pascoal, H. B.	4	3	Real .....	353
Onody, R. N.	5	3	Real .....	545	Pascual, M. F.	5	2	8 .....	488
Onody, R. N.	5	2	2 .....	495	Pascual, M. F.	4	3	Real .....	343
Onody, R. N.	4	3	Real .....	408	Pascual, M. F.	4	3	Real .....	340
Onody, R. N.	4	3	Real .....	409	Pascual, M. F.	4	3	Real .....	344
Oppenheim, I. F. C.	4	1	7 .....	233	Pascutti, P. G.	3	1	Rubi .....	1
Oppenheim, I. F. C.	4	1	7 .....	233	Pasqualucci, C. A.	5	1	Rubi .....	436
Oria, M. C. S.	4	1	5 .....	226	Pasqualucci, C. A.	5	1	Rubi .....	436
Oria, M. C. S.	5	3	Real .....	526	Passos, W. A. C.	3	3	Real .....	184
Origo, F. D.	5	3	Real .....	622	Paula, A. M.	4	3	Real .....	378
Ormeno, P. G. G.	3	3	Real .....	112	Paula, A. M.	5	1	Imperial...	457
Ortega, N. R. S.	3	3	Real .....	104	Paula, A. M.	4	3	Real .....	384
Osorio, F. A. P.	4	3	Real .....	366	Paula, A. M.	4	3	Real .....	363
Osorio, F. A. P.	4	3	Real .....	364	Paula, A. M.	5	2	Rubi .....	480
Osorio, F. A. P.	3	3	Real .....	143	Paula, A. M.	5	2	Rubi .....	480
Osorio, F. A. P.	5	3	Real .....	596	Paula, A. M.	3	1	Imperial...	23
Ota, A. T.	5	3	Real .....	503	Paula, C. A.	3	3	Real .....	113
P. Filho, R. A.	3	1	9 .....	33	Paula, G. L. S.	5	3	Real .....	513
Pacheco, G. M.	5	2	Topazio....	500	Paula, G. L. S.	5	3	Real .....	513
Pacheco, G. M.	4	3	Real .....	426	Pedroso, C. B.	3	3	Real .....	215
Pacheco, J. G.	4	3	Real .....	347	Pedroza, A. C.	4	3	Real .....	296
Pacheco, M. T. T.	5	1	Rubi .....	436	Pedroza, A. C.	5	1	5 .....	440
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	288	Pelegrini, F.	4	3	Real .....	328
Pacheco, M. T. T.	5	1	Rubi .....	437	Pelegrini, F.	3	3	Real .....	123
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	293	Pelegrini, F.	5	3	Real .....	608
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	291	Pena, A. F. V.	3	3	Real .....	201
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	294	Penaforte, J. C.	5	3	Real .....	652
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	291	Pendl Junior, W.	3	3	Real .....	127
Pacheco, M. T. T.	5	1	Rubi .....	436	Pendl Junior, W.	5	3	Real .....	560
Pacheco, M. T. T.	4	2	Rubi .....	260	Penna, T. J. P.	5	3	Real .....	518
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	421	Penna, T. J. P.	5	3	Real .....	536
Pacheco, M. T. T.	5	2	Topazio....	500	Penna, T. J. P.	5	3	Real .....	520
Pacheco, M. T. T.	4	2	Rubi .....	260	Penna, T. J. P.	5	2	Rubi .....	478
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	292	Penna, T. J. P.	5	3	Real .....	519
Pacheco, M. T. T.	5	1	Rubi .....	437	Pepe, I. M.	4	3	Real .....	360
Pacheco, M. T. T.	4	3	Real .....	292	Pepe, I. M.	3	3	Real .....	95
Paduan Filho, A.	5	2	7 .....	483	Pepe, I. M.	4	1	5 .....	226
Paduan Filho, A.	5	2	7 .....	483	Pepe, I. M.	5	2	Topazio....	499
Padua, S. J. N.	3	1	Topazio....	40	Pepe, I. M.	3	3	Real .....	165
Pagliuso, P. J. G.	5	3	Real .....	577	Pepe, I. M.	4	3	Real .....	398
Pagliuso, P. J. G.	5	3	Real .....	563	Pepino, R. T.	3	3	Real .....	191
Paiao, J. R. B.	4	3	Real .....	354	Pereira Jr, J. M.	5	2	4 .....	498
Paiva, J. A. C.	4	1	2 .....	237	Pereira Neto, J. A.	5	3	Real .....	624
Paiva, J. A. C.	4	2	2 .....	272	Pereira, A. C.	3	3	Real .....	68
Paiva, J. A. C.	4	1	2 .....	239	Pereira, A. R.	5	3	Real .....	608
Paiva, J. A. C.	3	2	6 .....	52	Pereira, D.	3	3	Real .....	89
Paiva, J. A. C.	5	3	Real .....	578	Pereira, D.	3	3	Real .....	220
Paiva, T. C. L.	5	1	9 .....	468	Pereira, D.	3	3	Real .....	94
Paiva, T. C. L.	3	1	7 .....	12	Pereira, D.	3	3	Real .....	216
Paixao Filho, F. J.	3	1	5 .....	5	Pereira, D.	4	3	Real .....	432
Paniago, R. M.	5	1	4 .....	471	Pereira, D.	3	3	Real .....	216
Parente, C. B. R.	5	3	Real .....	589	Pereira, D.	3	3	Real .....	214

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Pereira, D.	5	2	5	482	Pontuschka, W. M.	4	3	Real	354
Pereira, D. P.	4	1	2	238	Pontuschka, W. M.	4	3	Real	353
Pereira, J. R. D.	3	1	3	27	Pontuschka, W. M.	4	3	Real	353
Pereira, M. T.	3	2	Rubi	44	Portela, C. F.	3	3	Real	69
Pereira, M. T.	3	2	Rubi	43	Portugal, R. V.	3	3	Real	70
Pereira, R. A. R.	5	3	Real	648	Pozzo, L.	3	2	Rubi	44
Pereyra, I.	4	2	4	277	Prado, R. J.	4	2	4	277
Pereyra, I.	3	1	4	37	Prado, R. J.	5	3	Real	633
Pereyra, I.	5	3	Real	633	Prataviaera, G. A.	4	3	Real	305
Perez, J. L. J.	5	3	Real	629	Prazeres, G. M. P.	3	3	Real	71
Perottoni, C. A.	5	1	8	455	Priante, M. A.	4	3	Real	396
Petitprez, E.	4	3	Real	373	Priero, M. M.	4	2	6	268
Petitprez, E.	4	3	Real	373	Prudente, F. V.	5	3	Real	531
Petitprez, E.	3	2	Imperial	55	Prudente, F. V.	5	3	Real	533
Pfannes, H. K.	5	3	Real	608	Pureur Neto, P.	3	1	9	34
Pickholz, M. A.	3	3	Real	176	Pureur Neto, P.	4	2	9	276
Pilla, V.	5	3	Real	652	Pureur Neto, P.	3	1	9	32
Pilla, V.	5	2	6	489	Pureur Neto, P.	4	3	Real	412
Pimenta, M. A.	5	1	8	454	Pureur Neto, P.	3	1	9	33
Pimenta, M. A.	5	1	8	454	Pureur Neto, P.	3	1	9	33
Pimenta, M. A.	5	2	8	487	Pureur Neto, P.	3	3	Real	189
Pina, D. R.	4	3	Real	287	Pureur Neto, P.	4	3	Real	411
Pinheiro, C. B.	5	1	8	454	Qu, F.	4	3	Real	387
Pinheiro, C. B.	4	3	Real	359	Qu, F.	5	3	Real	606
Pinho, R. R.	3	2	4	62	Qu, F.	5	3	Real	592
Pinho, R. R.	4	1	Rubi	224	Quintale Junior, C.	5	3	Real	543
Pinho, R. R.	5	3	Real	525	Quintella, C. M. A. L. T.	5	3	Real	612
Pinho, S. T. R.	5	3	Real	541	Rabbani, S. R.	5	3	Real	583
Pinto Neto, A.	5	3	Real	596	Rabelo, J. N. T.	4	3	Real	343
Pinto, C. S.	3	3	Real	153	Rabelo, J. N. T.	3	3	Real	194
Pinto, R. D.	3	3	Real	97	Rabelo, J. N. T.	5	2	8	486
Pinto, R. D.	3	3	Real	105	Rabelo, J. N. T.	3	3	Real	103
Pinto, R. D.	5	3	Real	536	Racco, A.	5	3	Real	520
Piquini, P. C.	5	3	Real	594	Ramalho, C. M. Z.	4	3	Real	392
Pires Idiart, M. A.	5	3	Real	517	Ramalho, C. M. Z.	4	3	Real	396
Pires, A. S. T.	3	3	Real	116	Ramos, A. S.	4	3	Real	315
Pires, A. S. T.	3	3	Real	115	Ramos, L. R.	5	3	Real	569
Pires, A. S. T.	3	3	Real	104	Ranieri, I. M.	3	3	Real	220
Pires, M. A.	4	3	Real	358	Ranieri, I. M.	4	1	Topazio	256
Pirota, K. R.	5	1	7	446	Ranieri, I. M.	3	3	Real	209
Pizani, P. S.	3	3	Real	157	Ranieri, I. M.	3	3	Real	139
Pizani, P. S.	3	3	Real	125	Ranieri, I. M.	3	3	Real	217
Plascak, J. A.	4	1	Safira	230	Ranieri, I. M.	4	1	6	241
Plascak, J. A.	4	3	Real	318	Rebollo, M. A.	4	3	Real	428
Plastino, A. R.	3	3	Real	98	Rebollo, M. A.	4	3	Real	424
Plentz Filho, F. O.	4	1	Imperial	246	Rebollo, M. A.	4	3	Real	433
Polikarpov, I.	4	2	3	267	Redigolo, M. L.	4	3	Real	378
Polikarpov, I.	3	3	Real	75	Redigolo, M. L.	5	2	Rubi	480
Ponciano, B. M. B.	5	3	Real	534	Redinz, J. A.	4	3	Real	307
Ponciano, B. M. B.	5	3	Real	537	Redinz, J. A.	5	3	Real	535
Pontes, J. R. M.	5	3	Real	542	Rego, A. C. G. B.	5	2	Imperial	492
Pontes, M. J.	3	3	Real	221	Rego, A. C. G. B.	4	1	Topazio	255
Pontes, R. S.	3	3	Real	175	Rego, H. H. A.	4	3	Real	403
Pontes, R. S.	3	3	Real	181	Reis, F. D. A. A.	4	3	Real	408
Pontuschka, W. M.	4	3	Real	352	Reis, F. D. A. A.	4	3	Real	314
Pontuschka, W. M.	3	3	Real	130	Reis, F. D. A. A.	4	3	Real	400

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Reis, F. T.	5	3	Real .....	627	Romano, J. A.	4	3	Real .....	334
Rezende, M. F. S.	4	3	Real .....	342	Romano, J. A.	4	3	Real .....	326
Ribeiro Filho, J.	4	2	Imperial...	273	Romero, J. A. G.	5	3	Real .....	575
Ribeiro, A. A.	4	3	Real .....	384	Rosa, A. L. C.	4	3	Real .....	347
Ribeiro, C. A. L.	3	3	Real .....	107	Rosas, A. S.	4	3	Real .....	310
Ribeiro, C. T. M.	5	2	6 .....	489	Rosolen, J. M.	4	3	Real .....	342
Ribeiro, F. J.	4	3	Real .....	385	Rossi, A. M.	5	3	Real .....	580
Ribeiro, J. A. C. L.	5	1	Topazio....	476	Rossi, A. M.	5	3	Real .....	581
Ribeiro, J. A. C. L.	5	3	Real .....	631	Rossi, A. M.	3	3	Real .....	81
Ribeiro, J. A. J.	3	3	Real .....	222	Rossi, W.	4	1	6 .....	241
Ribeiro, M. S.	5	1	Rubi.....	435	Roversi, J. A.	5	3	Real .....	648
Ribeiro, P. E. L. C.	4	3	Real .....	283	Roversi, J. A.	3	1	Topazio....	42
Ribeiro, P. E. L. C.	4	3	Real .....	282	Rubinger, R. M.	5	3	Real .....	595
Ribeiro, P. E. L. C.	4	3	Real .....	282	Rubo, E. A. A.	3	3	Real .....	133
Ribeiro, R. A.	3	3	Real .....	186	Rubo, E. A. A.	5	3	Real .....	623
Ricci, T. S. F.	3	3	Real .....	110	Ruggiero, J. R.	3	3	Real .....	179
Riedtmann, R. W. W.	5	3	Real .....	625	Ruggiero, J. R.	3	3	Real .....	179
Ringhofer, K. H.	5	1	Topazio....	474	Ruggiero, J. R.	3	3	Real .....	72
Riofano, P. H. R.	3	3	Real .....	151	Ruggiero, L. O.	5	3	Real .....	623
Riofano, P. H. R.	4	3	Real .....	390	Ruggiero, L. O.	3	3	Real .....	133
Riske, K. A.	3	3	Real .....	72	Ruggiero, L. O.	5	3	Real .....	607
Rita, C. C. P.	4	3	Real .....	396	Ruggiero, L. O.	5	3	Real .....	623
Ritter, O. M.	3	3	Real .....	106	Ruiz, A. B. A.	3	3	Real .....	135
Riul Junior, A.	5	1	2 .....	462	Saavedra Filho, N. C.	4	3	Real .....	303
Rivera, A. R.	5	3	Real .....	563	Sabag, M. M. S.	4	3	Real .....	314
Rizzatti, M. R.	5	3	Real .....	643	Sachs, A. C.	3	3	Real .....	155
Roberty, H. M. B.	4	1	5 .....	225	Sachs, A. C.	5	3	Real .....	590
Rocha Filho, T. M.	5	3	Real .....	532	Sachs, A. C.	3	3	Real .....	208
Rocha Filho, T. M.	3	3	Real .....	92	Sachs, A. C.	5	3	Real .....	600
Rocha Filho, T. M.	5	3	Real .....	533	Sa, E. P. N.	5	3	Real .....	548
Rocha Filho, T. M.	4	3	Real .....	301	Saenger, J. F.	5	3	Real .....	610
Rocha Junior, K.	5	3	Real .....	549	Saguia, A. M.	5	3	Real .....	534
Rocha Junior, K.	5	3	Real .....	541	Saguia, A. M.	5	3	Real .....	537
Rocha Neto, J. F.	4	3	Real .....	304	Saitovitch, E. M. B.	5	3	Real .....	576
Rodrigues Junior, D.	3	3	Real .....	187	Saitovitch, E. M. B.	4	3	Real .....	330
Rodrigues Neto, C.	5	3	Real .....	515	Saitovitch, E. M. B.	5	3	Real .....	575
Rodrigues, A. R.	3	2	7 .....	49	Saitovitch, E. M. B.	4	3	Real .....	410
Rodrigues, C. G.	5	2	8 .....	488	Saitovitch, E. M. B.	4	3	Real .....	413
Rodrigues, C. G.	4	3	Real .....	344	Saitovitch, E. M. B.	4	3	Real .....	417
Rodrigues, E.	4	3	Real .....	427	Saitovitch, E. M. B.	5	3	Real .....	562
Rodrigues, E. S.	3	3	Real .....	149	Saitovitch, E. M. B.	5	3	Real .....	564
Rodrigues, G. J. B.	4	3	Real .....	327	Saitovitch, E. M. B.	3	3	Real .....	187
Rodrigues, J. B.	4	1	2 .....	240	Saitovitch, H.	5	3	Real .....	562
Rodrigues, M. G.	3	3	Real .....	82	Sakane, K. K.	4	3	Real .....	302
Rodrigues, P. A. M.	4	3	Real .....	389	Saleh, A. M.	3	3	Real .....	178
Rodrigues, P. A. M.	3	3	Real .....	168	Sales, J. A.	5	3	Real .....	534
Rodrigues, R. G. S.	5	3	Real .....	515	Sales, N. L. L.	3	3	Real .....	85
Rodrigues, R. G. S.	3	2	Rubi.....	43	Salinas, S. R. A.	4	3	Real .....	307
Rodrigues, S. C. P.	4	3	Real .....	381	Salinas, S. R. A.	4	3	Real .....	316
Rodrigues, V.	3	1	6 .....	18	Salvadori, M. C. B. S.	3	3	Real .....	200
Rodriguez, H. J. C.	5	3	Real .....	583	Salvadori, M. C. B. S.	3	3	Real .....	202
Rojas, J. R.	3	1	9 .....	32	Salvadori, M. C. B. S.	3	3	Real .....	206
Rojas, J. R.	4	3	Real .....	412	Salvadori, M. C. B. S.	3	3	Real .....	124
Rojas, J. R.	3	1	9 .....	33	Salvadori, M. C. B. S.	3	3	Real .....	204
Rojas, R. F. C.	5	1	6 .....	451	Samad, R. E.	5	3	Real .....	650
Rojas, R. F. C.	3	2	6 .....	53	Sampaio, J. F.	5	1	Imperial....	456

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Sampaio, J. F.	3	3	Real .....	148	Santos, M. C.	3	3	Real .....	178
Sampaio, J. F.	5	3	Real .....	592	Santos, M. C.	4	1	8 .....	249
Sanchez Junior, O.	4	3	Real .....	425	Santos, M. C.	3	3	Real .....	176
Sandim, M. J. R.	4	3	Real .....	412	Santos, M. S.	4	1	5 .....	227
Sangiorge, C. L.	3	2	2 .....	58	Santos, M. S.	3	2	5 .....	46
Sangiorge, C. L.	3	2	2 .....	58	Santos, R. M. Z.	3	1	Safira.....	8
Sangiorge, C. L.	5	3	Real .....	617	Santos, R. R.	4	3	Real .....	314
Sangiorge, C. L.	4	3	Real .....	397	Santos, R. R.	5	1	9 .....	468
Sanjurjo, N. L.	5	3	Real .....	554	Santos, R. R.	3	1	7 .....	12
Sant'anna, M. M.	3	3	Real .....	91	Saotome, O.	4	3	Real .....	294
Sant'anna, M. M.	4	2	5 .....	263	Saotome, O.	4	3	Real .....	291
Sant'anna, M. M.	3	3	Real .....	89	Sardella, E.	5	1	9 .....	469
Sant'anna, M. M.	4	2	5 .....	263	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	96
Santana, R. C.	3	3	Real .....	132	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	98
Santana, R. C.	3	3	Real .....	127	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	108
Santana, R. G.	5	3	Real .....	636	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	174
Santana, R. R. C.	5	3	Real .....	593	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	97
Santo, A. M. E.	3	3	Real .....	120	Sartorelli, J. C.	3	3	Real .....	105
Santos Filho, A. R. G.	5	3	Real .....	649	Sartorelli, J. C.	5	3	Real .....	536
Santos Filho, H. J.	5	3	Real .....	565	Sartori, C. S.	3	1	5 .....	5
Santos Junior, S.	4	3	Real .....	340	Sartori, C. S.	3	1	5 .....	5
Santos, A. C. F.	3	3	Real .....	91	Sathaiah, S.	5	1	Rubi.....	436
Santos, A. C. F.	3	1	5 .....	6	Sathaiah, S.	5	1	Rubi.....	436
Santos, A. C. F.	4	2	5 .....	263	Sathaiah, S.	4	2	Rubi.....	260
Santos, A. C. F.	4	2	5 .....	263	Sathaiah, S.	4	3	Real .....	292
Santos, A. J. J.	3	3	Real .....	125	Sauerwein, R. A.	5	3	Real .....	535
Santos, C. A.	5	3	Real .....	553	Saxena, R. N.	3	3	Real .....	128
Santos, C. A.	5	3	Real .....	561	Saxena, R. N.	3	3	Real .....	127
Santos, C. A.	3	1	7 .....	13	Saxena, R. N.	5	3	Real .....	552
Santos, C. A.	3	1	4 .....	35	Saxena, R. N.	5	3	Real .....	560
Santos, C. A.	3	1	8 .....	14	Scala Junior, N. L.	4	3	Real .....	362
Santos, C. A. M.	5	1	9 .....	468	Scala Junior, N. L.	4	3	Real .....	362
Santos, C. A. M.	4	3	Real .....	418	Scalabrin, A.	3	3	Real .....	220
Santos, C. A. M.	3	1	9 .....	32	Scalabrin, A.	3	3	Real .....	216
Santos, C. B.	5	3	Real .....	519	Scalabrin, A.	4	3	Real .....	432
Santos, C. C. M.	5	3	Real .....	509	Scalabrin, A.	3	3	Real .....	216
Santos, C. C. M.	3	3	Real .....	72	Scalabrin, A.	3	3	Real .....	214
Santos, C. G.	3	3	Real .....	180	Scalabrin, A.	5	2	5 .....	482
Santos, C. G.	3	3	Real .....	177	Scalvi, L. V. A.	5	3	Real .....	607
Santos, C. G.	5	1	2 .....	461	Scalvi, L. V. A.	3	3	Real .....	152
Santos, C. O. P.	5	2	8 .....	487	Scalvi, R. M. F.	3	3	Real .....	133
Santos, D. C. R.	4	3	Real .....	396	Scalvi, R. M. F.	5	3	Real .....	623
Santos, D. G.	3	3	Real .....	131	Scherer, C.	3	3	Real .....	110
Santos, D. L. P.	3	3	Real .....	154	Scherer, C.	5	3	Real .....	572
Santos, D. L. P.	3	2	4 .....	61	Schetttert, P. G.	5	3	Real .....	587
Santos, D. S.	5	1	7 .....	447	Schilling Neto, O. F.	3	1	9 .....	34
Santos, F. L.	5	1	2 .....	462	Schmidt, J. E.	4	3	Real .....	328
Santos, F. L.	3	1	2 .....	29	Schmidt, J. E.	4	3	Real .....	335
Santos, G. C.	5	3	Real .....	510	Schmidt, J. E.	4	3	Real .....	332
Santos, J. G.	4	3	Real .....	352	Schmidt, J. E.	4	3	Real .....	334
Santos, J. G.	4	3	Real .....	354	Schmidt, J. E.	4	3	Real .....	326
Santos, L. F.	5	3	Real .....	615	Schulz, P. A. B.	4	3	Real .....	365
Santos, M.	4	3	Real .....	323	Schulz, P. A. B.	3	1	Imperial...	24
Santos, M.	4	3	Real .....	321	Schulz, P. A. B.	3	3	Real .....	151
Santos, M. B. L.	3	3	Real .....	100	Schulz, P. A. B.	4	3	Real .....	390
Santos, M. B. L.	5	2	3 .....	493	Schulz, P. A. B.	4	3	Real .....	370

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Schulz, P. A. B.	5	3	Real .....	597	Silva, C. M. S. V.	3	3	Real .....	171
Scolfaro, L. M. R.	5	3	Real .....	593	Silva, C. R.	3	3	Real .....	101
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	363	Silva, E. A. A.	5	1	Imperial...	457
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	370	Silva, E. A. A.	4	3	Real .....	380
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	381	Silva, E. C.	3	3	Real .....	155
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	376	Silva, E. C.	3	3	Real .....	81
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	376	Silva, E. C.	3	3	Real .....	154
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	375	Silva, E. C.	4	3	Real .....	334
Scolfaro, L. M. R.	5	1	Imperial...	456	Silva, E. C.	3	1	3 .....	27
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	378	Silva, E. C.	4	3	Real .....	326
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	369	Silva, E. C.	3	3	Real .....	142
Scolfaro, L. M. R.	4	3	Real .....	368	Silva, E. C.	4	3	Real .....	371
Segundo, P. C. S.	5	3	Real .....	526	Silva, E. C.	3	3	Real .....	68
Senna, L. F.	3	3	Real .....	202	Silva, E. G. M.	5	3	Real .....	563
Senna, L. F.	3	3	Real .....	205	Silva, E. P.	5	3	Real .....	546
Serbena, F. C.	4	2	6 .....	270	Silva, F. C. S.	5	1	7 .....	446
Sercheli, M. S.	3	3	Real .....	205	Silva, G. J.	5	3	Real .....	613
Shamshour, D.	4	1	9 .....	251	Silva, G. J.	3	1	3 .....	26
Shaoping, B.	3	2	8 .....	50	Silva, G. M.	4	3	Real .....	296
Sharma, S. S.	5	3	Real .....	528	Silva, G. M.	3	3	Real .....	175
Shibli, S. M.	3	3	Real .....	173	Silva, G. M.	5	1	2 .....	460
Shibli, S. M.	5	3	Real .....	611	Silva, G. M.	3	3	Real .....	178
Shida, C. S.	4	3	Real .....	313	Silva, I. G.	5	3	Real .....	523
Shida, C. S.	5	3	Real .....	502	Silva, I. G.	3	2	5 .....	45
Shigue, C. Y.	4	3	Real .....	414	Silva, I. G.	5	3	Real .....	652
Shigue, C. Y.	3	3	Real .....	190	Silva, I. G.	4	1	2 .....	237
Shigue, C. Y.	3	3	Real .....	188	Silva, I. G.	5	3	Real .....	530
Shukla, M. M.	3	3	Real .....	145	Silva, I. G.	4	1	2 .....	238
Shukla, M. M.	3	1	6 .....	20	Silva, J. B.	5	2	7 .....	484
Shukla, M. M.	5	3	Real .....	573	Silva, J. G. M.	3	3	Real .....	97
Shukla, M. M.	5	3	Real .....	574	Silva, J. J.	5	3	Real .....	604
Shukla, M. M.	5	3	Real .....	571	Silva, L.	3	3	Real .....	101
Silva Filho, A. C.	5	3	Real .....	506	Silva, L.	3	3	Real .....	101
Silva Filho, A. C.	4	3	Real .....	322	Silva, L. C.	5	3	Real .....	544
Silva Filho, A. C.	5	3	Real .....	515	Silva, L. G. G. V. D.	3	3	Real .....	107
Silva Filho, A. C.	3	2	Rubi .....	43	Silva, L. R.	4	3	Real .....	407
Silva Filho, H. F.	3	3	Real .....	214	Silva, M. A.	4	1	3 .....	236
Silva Filho, J. P.	3	3	Real .....	182	Silva, M. A. A.	3	1	Imperial...	24
Silva Jr, E. F.	5	3	Real .....	603	Silva, M. A. A.	3	3	Real .....	140
Silva Jr, E. F.	3	3	Real .....	218	Silva, M. A. A.	4	3	Real .....	391
Silva Jr, E. F.	5	3	Real .....	598	Silva, M. A. A.	4	3	Real .....	402
Silva, A. A.	3	2	2 .....	58	Silva, M. A. A.	4	3	Real .....	406
Silva, A. A.	5	3	Real .....	627	Silva, M. A. P.	4	2	2 .....	271
Silva, A. A.	4	1	6 .....	244	Silva, M. C. L.	5	3	Real .....	517
Silva, A. A.	4	2	2 .....	272	Silva, M. D.	3	3	Real .....	69
Silva, A. A.	5	3	Real .....	624	Silva, M. P.	4	1	2 .....	237
Silva, A. A. P.	3	3	Real .....	146	Silva, M. P.	4	3	Real .....	355
Silva, A. L.	3	2	2 .....	58	Silva, M. P.	4	1	2 .....	238
Silva, A. L.	5	3	Real .....	617	Silva, M. R.	5	3	Real .....	557
Silva, A. L. C.	3	3	Real .....	194	Silva, M. R.	3	3	Real .....	185
Silva, A. M. M.	4	3	Real .....	286	Silva, M. R. S.	5	3	Real .....	551
Silva, A. P. B.	4	2	2 .....	271	Silva, M. R. S.	5	3	Real .....	565
Silva, A. V. B.	5	2	Topazio....	499	Silva, M. S. F.	3	1	6 .....	20
Silva, A. V. B.	3	3	Real .....	165	Silva, M. S. F.	3	3	Real .....	117
Silva, A. V. B.	4	3	Real .....	398	Silva, M. T. O.	4	3	Real .....	378
Silva, C. A. M.	4	3	Real .....	415	Silva, O.	3	1	3 .....	27

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Silva, P. R. J.	5	3	Real .....	562	Sombra, A. S. B.	3	3	Real .....	219
Silva, R.	5	1	8 .....	448	Sombra, A. S. B.	5	1	6 .....	452
Silva, R. A.	4	3	Real .....	340	Sombra, A. S. B.	4	1	2 .....	239
Silva, R. B.	4	3	Real .....	421	Sombra, A. S. B.	3	2	6 .....	52
Silva, R. B.	5	2	Topazio....	500	Sombra, A. S. B.	5	3	Real .....	578
Silva, R. C.	5	1	Imperial....	459	Sousa, A. O.	4	3	Real .....	400
Silva, R. C.	4	3	Real .....	330	Sousa, A. O.	4	3	Real .....	407
Silva, R. M.	5	3	Real .....	536	Sousa, D. F.	4	3	Real .....	361
Silva, S.	3	3	Real .....	202	Sousa, J. R.	4	3	Real .....	319
Silva, S. W.	4	3	Real .....	381	Sousa, J. R.	4	3	Real .....	318
Silva, S. W.	3	2	Imperial....	54	Sousa, J. R.	4	3	Real .....	317
Silva, S. W.	4	3	Real .....	378	Sousa, K. M. O.	3	3	Real .....	84
Silva, T. J.	5	3	Real .....	538	Sousa, M. H.	4	1	8 .....	250
Silveira Junior, L.	5	1	Rubi.....	436	Souza, A. C. A.	5	3	Real .....	617
Silveira Junior, L.	4	3	Real .....	293	Souza, D. N.	3	3	Real .....	133
Silveira Junior, L.	4	2	Rubi.....	260	Souza, E. A.	5	2	Imperial....	491
Silveira Junior, L.	4	2	Rubi.....	260	Souza, E. R.	5	3	Real .....	504
Silveira Junior, L.	5	1	Rubi.....	437	Souza, I. C. L.	4	3	Real .....	357
Silveira Junior, L.	4	3	Real .....	292	Souza, I. C. L.	4	3	Real .....	356
Silveira, D. M.	5	3	Real .....	630	Souza, J. F.	4	3	Real .....	288
Silveira, E. F.	4	1	Rubi.....	223	Souza, M. A. R.	3	3	Real .....	147
Silveira, E. F.	5	3	Real .....	525	Souza, M. F.	4	2	6 .....	269
Silveira, E. F.	5	3	Real .....	641	Souza, M. H. S.	4	3	Real .....	420
Silveira, E. F.	3	3	Real .....	119	Souza, M. O. M. D.	5	3	Real .....	578
Silveira, E. F.	3	3	Real .....	197	Souza, M. O. M. D.	5	3	Real .....	638
Simao, R. A.	5	1	4 .....	473	Souza, M. O. M. D.	5	3	Real .....	550
Simoes Filho, M.	5	1	3 .....	464	Souza, R. E.	4	3	Real .....	357
Simoes, C. S.	3	2	Safira.....	48	Souza, R. E.	4	3	Real .....	356
Simoes, C. S.	5	3	Real .....	544	Souza, R. F.	3	3	Real .....	209
Simonetti, R.	5	3	Real .....	512	Souza, R. R.	3	3	Real .....	188
Simonetti, R.	5	3	Real .....	516	Souza, R. R.	4	3	Real .....	397
Simon, G.	5	3	Real .....	561	Souza, S. D.	5	3	Real .....	578
Sipahi, G. M.	4	3	Real .....	376	Souza, S. D.	5	3	Real .....	638
Sipahi, G. M.	4	3	Real .....	375	Souza, S. D.	5	3	Real .....	550
Sipahi, G. M.	5	1	Imperial....	456	Souza, T. M.	3	3	Real .....	203
Siqueira, A. F.	3	3	Real .....	136	Sperandio, A. L.	3	3	Real .....	159
Siqueira, A. F.	4	3	Real .....	400	Speziali, N. L.	5	1	8 .....	454
Siqueira, A. F.	4	3	Real .....	402	Speziali, N. L.	4	3	Real .....	359
Siqueira, A. F.	5	3	Real .....	521	Speziali, N. L.	4	3	Real .....	340
Siqueira, A. F.	4	3	Real .....	406	Speziali, N. L.	5	2	8 .....	487
Siqueira, A. F.	5	3	Real .....	539	Stabile, M. A.	3	3	Real .....	161
Siqueira, A. F.	4	3	Real .....	407	Stabile, M. A.	4	3	Real .....	349
Siuiti Ito, A.	5	3	Real .....	503	Stabile, M. A.	4	3	Real .....	345
Siuiti Ito, A.	3	3	Real .....	66	Sthel, M. S.	3	3	Real .....	213
Siuiti Ito, A.	5	3	Real .....	506	Sthel, M. S.	5	3	Real .....	570
Soares Neto, J. J.	5	3	Real .....	531	Stosic, B.	5	1	Safira.....	442
Soares Neto, J. J.	5	3	Real .....	533	Stosic, B.	5	3	Real .....	598
Soares Neto, J. J.	5	3	Real .....	532	Suassuma Filho, J.	3	3	Real .....	120
Soares Neto, J. J.	5	3	Real .....	532	Surdutovich, G. I.	5	3	Real .....	644
Soares Neto, J. J.	3	3	Real .....	92	Surdutovich, G. I.	3	3	Real .....	200
Soares, J. A. N. T.	4	3	Real .....	388	Surdutovich, G. I.	5	3	Real .....	634
Soares, L. L.	5	1	Topazio....	477	Surdutovich, G. I.	3	3	Real .....	203
Soares, L. S. M.	3	3	Real .....	192	Surdutovich, G. I.	5	3	Real .....	650
Soler, M. A. G.	3	3	Real .....	119	Surdutovich, G. I.	4	1	2 .....	239
Sombra, A. S. B.	4	1	2 .....	237	Surdutovich, G. I.	5	3	Real .....	647
Sombra, A. S. B.	4	2	2 .....	272	Surdutovich, G. I.	5	3	Real .....	578

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Suzuki, P. A.	4	3	Real .....	412	Tenan, M. A.	5	3	Real .....	521
Suzuki, P. A.	4	3	Real .....	413	Tenan, M. A.	3	3	Real .....	108
Symko, O. G.	5	2	9 .....	496	Tenorio, A. C.	5	1	2 .....	462
Szeinfeld, R. I. N.	4	3	Real .....	401	Teso, A.	3	3	Real .....	179
Tabacniks, M. H.	5	3	Real .....	636	Tessis, A. C. S. C.	4	2	Rubi.....	259
Tabacniks, M. H.	5	3	Real .....	633	Tessis, A. C. S. C.	4	2	Rubi.....	258
Tabacniks, M. H.	5	3	Real .....	622	Tessler, L. R.	4	2	4 .....	278
Tabacniks, M. H.	4	1	7 .....	234	Thieghi, L. T.	3	3	Real .....	173
Tabacniks, M. H.	4	3	Real .....	335	Tiago, M. L.	3	3	Real .....	106
Tabacniks, M. H.	5	3	Real .....	639	Toginho Filho, D. O.	4	3	Real .....	374
Tabak, M.	4	2	Rubi.....	258	Toledo, A. O.	3	3	Real .....	93
Tabak, M.	3	3	Real .....	83	Tolentino, H. C. N.	4	3	Real .....	346
Tabak, M.	4	1	Rubi.....	224	Tolentino, H. C. N.	4	3	Real .....	345
Tabak, M.	3	3	Real .....	76	Tolentino, H. C. N.	3	3	Real .....	195
Tabak, M.	3	3	Real .....	77	Tolentino, H. C. N.	3	3	Real .....	197
Tabak, M.	3	3	Real .....	86	Tolentino, H. C. N.	4	3	Real .....	348
Tabares, R. H.	4	3	Real .....	431	Tominaga, T. T.	3	3	Real .....	77
Tabares, R. H.	4	3	Real .....	419	Torres, M. A. M.	4	3	Real .....	330
Tabosa, J. W. R.	5	3	Real .....	523	Torriani, I. C. L.	5	3	Real .....	563
Tabosa, J. W. R.	4	2	Topazio....	279	Tosim, M. C.	3	3	Real .....	203
Tabosa, J. W. R.	3	1	Topazio....	41	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	610
Takahashi, E. K.	4	3	Real .....	369	Tourinho, F. A.	4	1	8 .....	250
Takahashi, E. K.	4	3	Real .....	368	Tourinho, F. A.	3	1	3 .....	26
Takeuchi, A. Y.	5	3	Real .....	551	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	609
Takeuchi, A. Y.	5	3	Real .....	562	Tourinho, F. A.	3	2	3 .....	56
Takeuchi, A. Y.	5	3	Real .....	565	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	613
Tamarit, F. A.	4	3	Real .....	316	Tourinho, F. A.	3	1	3 .....	26
Tamarit, F. A.	4	3	Real .....	307	Tourinho, F. A.	3	1	3 .....	28
Tamarit, F. A.	3	3	Real .....	101	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	608
Tamarit, F. A.	3	3	Real .....	101	Tourinho, F. A.	3	1	3 .....	27
Tamashiro, M. N.	4	3	Real .....	307	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	609
Tamura, E.	4	3	Real .....	345	Tourinho, F. A.	5	3	Real .....	608
Tamura, E.	4	3	Real .....	348	Tragtenberg, M. H. R.	4	3	Real .....	321
Tarelho, L. V. G.	3	3	Real .....	220	Tragtenberg, M. H. R.	5	3	Real .....	522
Tarelho, L. V. G.	3	3	Real .....	209	Travain, S. A.	5	3	Real .....	574
Tarelho, L. V. G.	3	3	Real .....	139	Tretiakov, N.	5	3	Real .....	569
Tarelho, L. V. G.	3	3	Real .....	217	Tretiakov, N.	5	1	8 .....	449
Tatumi, S. H.	3	3	Real .....	126	Tretiakov, N.	4	3	Real .....	343
Tavares, E. C. S.	3	3	Real .....	125	Tretiakov, N.	3	3	Real .....	103
Tavares, M. R. S.	4	3	Real .....	383	Tribuzy, C. V.	5	3	Real .....	576
Teixeira, A. M.	4	2	2 .....	272	Tribuzy, C. V.	5	3	Real .....	550
Teixeira, A. M. R.	4	3	Real .....	391	Triches, D. M.	3	3	Real .....	166
Teixeira, C. B.	5	3	Real .....	609	Trippe, S. C.	3	3	Real .....	200
Teixeira, C. V.	3	3	Real .....	74	Trippe, S. C.	4	3	Real .....	412
Teixeira, C. V.	3	3	Real .....	170	Triques, A. L. C.	3	3	Real .....	151
Teixeira, N. G.	3	3	Real .....	191	Triques, A. L. C.	4	3	Real .....	385
Teixeira, R. C.	4	3	Real .....	396	Triques, A. L. C.	4	1	Imperial....	246
Teixeira, R. M. R.	5	3	Real .....	640	Tronconi, A. L.	5	3	Real .....	608
Teixeira, S. R.	4	2	4 .....	278	Tronconi, A. L.	3	3	Real .....	185
Teixeira, S. R.	5	3	Real .....	625	Tronconi, A. L.	5	3	Real .....	608
Teixeira, S. R.	4	3	Real .....	334	Troper, A.	3	3	Real .....	117
Teixeira, S. R.	4	3	Real .....	351	Troper, A.	3	3	Real .....	113
Teixeira, S. R.	3	1	4 .....	35	Troper, A.	3	1	7 .....	12
Teles, L. K.	3	3	Real .....	162	Troper, A.	3	1	7 .....	10
Telles, D. A. L.	4	1	9 .....	253	Troper, A.	3	3	Real .....	116
Telles, D. A. L.	4	3	Real .....	416	Troper, A.	3	3	Real .....	111

Autor	Dia	Período	Sala	Pág.	Autor	Dia	Período	Sala	Pág.
Trzesniak, P.	3	3	Real .....	125	Vianna, S. S.	3	1	Topazio....	41
Tsalis, C.	3	1	Safira.....	9	Vicente, R.	5	3	Real .....	517
Tsalis, C.	3	1	Safira.....	7	Vicentin, F. C.	5	1	4 .....	472
Tuboy, A. M.	4	2	Topazio....	280	Vicentin, F. C.	4	3	Real .....	346
Tuboy, A. M.	5	3	Real .....	529	Vicentin, F. C.	3	3	Real .....	195
Tuboy, A. M.	4	1	5 .....	227	Vicentin, F. C.	4	3	Real .....	348
Tuboy, A. M.	5	3	Real .....	528	Vidoto, E. A.	5	3	Real .....	583
Tufaile, A.	3	3	Real .....	96	Viegas, A. C.	4	3	Real .....	335
Tufaile, A.	3	3	Real .....	98	Viegas, A. C.	4	3	Real .....	332
Tufaile, A. P. B.	4	1	7 .....	232	Vieira Junior, N. D.	5	3	Real .....	650
Turchiello, R. F.	3	3	Real .....	66	Vieira Junior, N. D.	3	3	Real .....	209
Ugarte, D. M.	3	1	6 .....	18	Vieira Junior, N. D.	3	3	Real .....	139
Ugarte, D. M.	4	3	Real .....	346	Vieira Junior, N. D.	4	1	6 .....	241
Ugarte, D. M.	3	3	Real .....	195	Vieira Junior, N. D.	3	3	Real .....	131
Umeda, E.	5	3	Real .....	543	Vieira, A. P.	5	3	Real .....	549
Urahata, S. M.	4	3	Real .....	305	Vieira, A. P.	5	3	Real .....	541
Valente, L. C. G.	5	1	6 .....	450	Vieira, A. P.	4	3	Real .....	312
Valente, L. C. G.	5	1	6 .....	451	Vieira, C. A.	5	2	5 .....	481
Valente, L. C. G.	3	2	Topazio....	64	Vilhena, F. S. D. S.	5	3	Real .....	510
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	125	Villaverde, A. G. J. B.	3	3	Real .....	215
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	131	Viscovini, R. C.	4	3	Real .....	432
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	131	Viscovini, R. C.	3	3	Real .....	216
Valerio, M. E. G.	3	1	8 .....	15	Vitlina, R. Z.	5	3	Real .....	644
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	133	Vitlina, R. Z.	5	3	Real .....	634
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	128	Vollet, D. R.	5	3	Real .....	612
Valerio, M. E. G.	3	3	Real .....	134	Vollet, D. R.	5	3	Real .....	610
Valerio, M. E. G.	3	1	8 .....	16	Vugman, N. V.	5	3	Real .....	581
Vallejo, D. F. G.	5	3	Real .....	502	Vugman, N. V.	4	1	3 .....	235
Varriale, M. C.	5	3	Real .....	572	Wagner, P. R. S.	3	1	2 .....	31
Vasconcellos, E. C. C.	3	3	Real .....	221	Walf, G. H.	5	3	Real .....	564
Vasconcellos, M. A. Z.	5	3	Real .....	641	Walmsley, L. C. M.	3	1	6 .....	19
Vasconcellos, M. A. Z.	5	3	Real .....	629	Walmsley, L. C. M.	3	1	2 .....	30
Vasconcellos, M. A. Z.	4	2	6 .....	269	Weber, G.	5	1	Imperial....	457
Vasconcellos, M. A. Z.	3	1	4 .....	35	Weber, G.	4	3	Real .....	372
Vasconcellos, M. A. Z.	3	2	4 .....	62	Weinschutz, S. M.	4	3	Real .....	416
Vasconcelos, A. J.	5	1	8 .....	454	Weissmuller, G.	3	3	Real .....	78
Vasconcelos, D. S.	4	3	Real .....	341	Weissmuller, G.	3	3	Real .....	87
Vasconcelos, D. S.	4	3	Real .....	308	Weissmuller, G.	3	3	Real .....	84
Vasconcelos, D. S.	4	3	Real .....	339	Westphal, C. H.	4	3	Real .....	415
Vasconcelos, G.	5	3	Real .....	589	Woehl Junior, G.	3	3	Real .....	214
Vasconcelos, M. S.	4	3	Real .....	379	Wolfenson, A. E.	3	1	2 .....	31
Vaz, A. R.	3	3	Real .....	199	Wysin, G. M.	3	1	Safira.....	9
Vega, M. L.	5	3	Real .....	584	Xavier, J. C.	4	3	Real .....	320
Veiga, W.	3	3	Real .....	196	Xavier, J. C.	3	2	Safira.....	47
Veissid, N.	3	3	Real .....	159	Xun, X.	3	3	Real .....	146
Veissid, N.	3	3	Real .....	165	Yasuoka, F. M. M.	4	3	Real .....	429
Venezuela, P. P. M.	4	2	Imperial....	274	Yokoi, C. S. O.	4	3	Real .....	324
Venezuela, P. P. M.	5	2	8 .....	486	Yokoi, C. S. O.	4	3	Real .....	324
Ventura, D. R.	5	2	8 .....	487	Yonamine, T.	4	1	7 .....	232
Ventura, L.	4	2	Rubi.....	261	Yukalov, V. I.	4	3	Real .....	312
Venturini, Y. R.	5	3	Real .....	507	Zampronio, M. A.	5	3	Real .....	643
Vianna, J. D. M.	4	3	Real .....	298	Zanatta, A. R.	5	1	4 .....	472
Vianna, J. D. M.	4	3	Real .....	300	Zanchet, D.	3	3	Real .....	168
Vianna, J. D. M.	4	3	Real .....	304	Zanchet, D.	3	3	Real .....	197
Vianna, S. S.	5	3	Real .....	523	Zanelatto, G.	3	3	Real .....	154
Vianna, S. S.	4	2	Topazio....	279	Zangaro, R. A.	5	1	Rubi.....	436

Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.	Autor	Dia	Periodo	Sala	Pág.
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	293	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	653
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	291	Zilio, S. C.	3	2	5 .....	46
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	294	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	646
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	291	Zilio, S. C.	3	3	Real .....	141
Zangaro, R. A.	5	1	Rubi.....	436	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	588
Zangaro, R. A.	4	2	Rubi.....	260	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	527
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	421	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	527
Zangaro, R. A.	5	2	Topazio.....	500	Zilio, S. C.	5	3	Real .....	528
Zangaro, R. A.	4	2	Rubi.....	260	Zolotoyabko, E.	5	1	8 .....	448
Zangaro, R. A.	4	3	Real .....	292	Zubov, V. I.	5	2	8 .....	488
Zangaro, R. A.	5	1	Rubi.....	437	Zubov, V. I.	5	3	Real .....	569
Zara, R. A.	4	3	Real .....	409	Zubov, V. I.	4	3	Real .....	343
Zeri, A. C. M.	3	3	Real .....	77	Zubov, V. I.	3	3	Real .....	194
Ze Zell, D. M.	5	1	Rubi.....	435	Zubov, V. I.	4	3	Real .....	344
Ziemath, E. C.	4	3	Real .....	356	Zubov, V. I.	5	1	8 .....	449
Zilio, S. C.	5	3	Real .....	650	Zubov, V. I.	5	2	8 .....	486
Zilio, S. C.	3	2	5 .....	46	Zubov, V. I.	4	3	Real .....	343
Zilio, S. C.	3	3	Real .....	139	Zucchi, M. R.	3	3	Real .....	77
Zilio, S. C.	4	1	5 .....	227					
Zilio, S. C.	4	2	Topazio.....	280					